
TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO EM FÍSICA: MAPEAMENTO CLÁSSICO—QUÂNTICO - UM ESTUDO NUMÉRICO DO MODELO DE ISING

Alex Enrique Crispim, Eduardo Peres Novais de Sá
Centro de Ciências Naturais e Humanas (CCNH)
Universidade Federal do ABC
Santo Andre - São Paulo
alexenriquecrispim@gmail.com

24 de outubro de 2019

RESUMO

Neste trabalho, exploramos a técnica do mapeamento clássico-quântico, com base no Modelo de Ising. De forma geral, acredita-se que a função de partição de um modelo quântico de dimensão d possa ser mapeada na função de partição de um modelo clássico de dimensão $d + 1$. Aplicando-se esta técnica ao Modelo de Ising quântico, pode-se calcular observáveis quânticos por meio de simulações computacionais do modelo clássico. Com esta abordagem, estudamos propriedades do sistema quântico como correlações e o emaranhamento da rede. Ao final, observa-se um aumento nas correlações entre os spins e o surgimento de estados emaranhados abaixo da temperatura crítica, verificando-se a violação de uma desigualdade de Bell para primeiros vizinhos e também para sítios mais afastados. Mais ainda, a saturação desta desigualdade no limite $T \rightarrow 0$ nos mostra que os spins tendem a se encontrar em um estado de Bell onde estão alinhados, justificando o surgimento da magnetização do sistema e a formação de ilhas.

1 Introdução

1.1 Contextualização

O Modelo de Ising surgiu na década de 1920 como uma forma simplificada para o estudo de sistemas magnéticos [1, 2]. Originalmente, o modelo consistia de um conjunto de variáveis clássicas de spins (i.e., que comutam entre si), arranjadas em uma rede quadrada [3]. A energia do sistema é dada pela Hamiltoniana [3, 4]

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i, \quad (1)$$

onde $\langle i, j \rangle$ significa soma sobre os primeiros vizinhos j do sítio i . O primeiro termo representa uma forma de interação entre os spins e o segundo termo, denota a ação de um campo magnético externo \vec{B} . Neste modelo, toma-se que $\sigma \in \{-1, +1\}$, o que representaria a quantização do momento angular spin em uma dada direção, para um sistema de spins-1/2 [5, 4].

A motivação para o estudo do modelo, na época, residia em entender sistemas magnéticos e transições de fase de ordem-desordem (segunda ordem); algo que se tinha pouco conhecimento até então [2]. Sendo assim, o objetivo principal era verificar algumas das hipóteses acerca de transições de segunda ordem existentes na época, como a divergência de certas quantidade na forma de leis de potencia, na região de criticalidade [4].

Em uma dimensão, o modelo é descrito por pontos discretos sobre uma linha, igualmente espaçados. Esta foi a primeira tentativa de solução do modelo no qual Ising trabalhou, chegando a conclusão de que o modelo não apresentava

transição de fase em uma dimensão [1, 6]. Com base em alguns argumentos, Ising foi levado a acreditar que não haveria transição de fase para dimensões mais altas. No entanto, em 1936, Peierls mostrou que o modelo apresentava uma transição de fase em dimensões maiores ou iguais a dois, despertando interesse dos Físicos no modelo, novamente [7].

No início da década de 1940, é publicada a chamada *dualidade de Kramers-Wannier* para o Modelo de Ising [8, 9]. Tal dualidade se apresenta como uma relação de simetria intrínseca do modelo que possibilitou aos autores estabelecer a temperatura de transição de fase para o modelo, sob a hipótese de que a mesma deveria ser única. Logo após, em 1944, Onsager publicou uma solução exata para o modelo em duas dimensões mostrando a existência de uma temperatura crítica, compatível com a obtida por Kramers e Wannier [10], e posteriormente uma dependência da magnetização resultante do sistema com a temperatura, mostrando a transição de fase de segunda ordem [11].

Este sendo o primeiro modelo a ser resolvido que apresentava uma transição de fase, acabou se tornando de fundamental importância para o entendimento de transições de segunda ordem. A solução de Onsager foi posteriormente generalizada para outros sistemas físicos dando origem ao estudo de sistema integráveis [2, 4, 12].

1.2 Mapeamento Clássico-Quântico

A construção que liga uma teoria estatística clássica e uma teoria quântica é conhecida como *mapeamento clássico-quântico*. De maneira geral, acredita-se que a função de partição de um sistema quântico de dimensão D pode ser exatamente mapeada na função de partição de um sistema clássico de dimensão $D + 1$, e vice-versa.

Usando este formalismo, a função de partição do modelo de Ising clássico em duas dimensões pode ser reescrita como a função de partição do modelo quântico [4, 13]

$$\hat{H}_\lambda = -J \sum_{i=1}^N [\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + \lambda \hat{\sigma}_i^x], \quad (2)$$

onde $\hat{\sigma}^\alpha$ são as matrizes de Pauli e λ um parâmetro real. A Hamiltoniana acima é conhecida como *modelo quântico de Ising unidimensional*.

A solução de Onsager para o modelo clássico mostra que há uma transição de fase para uma temperatura T_c dada por [10, 5, 3]

$$\beta_c J = \frac{\ln(1 + \sqrt{2})}{2}, \quad \beta_c = \frac{1}{kT_c}, \quad (3)$$

que corresponde a uma transição de fase no modelo quântico quando $\lambda = \lambda_c = 1$ [4].

1.3 Objetivo

O presente projeto tem por objetivo estudar a Hamiltoniana em (2) de forma numérica. Utilizando-se do mapeamento clássico-quântico, mapearemos observáveis quânticos em valores esperados do modelo clássico bidimensional (1), com o objetivo de calcular os observáveis desejados simulando computacionalmente o modelo clássico, cuja complexidade é significativamente menor [14, 15]. Desta forma, podemos estudar correlações no modelo quânticos próximos da criticalidade e, em particular, estudar o emaranhamento na cadeia quântica de Ising por meio de um funcional de Bell [16].

Notação

Ao longo do trabalho denotamos operadores como \hat{A} . Para evitar problemas de entendimento, spins ditos clássicos serão denotados simplesmente por σ , enquanto que operadores de spins, além de seguir a notação de operadores, sempre estarão acompanhados de um superscrito para denotar a matriz de Pauli em questão, a exemplo: $\hat{\sigma}^x$.

2 Os Modelos de Ising Clássico e Quântico

2.1 O Modelo Clássico

O Modelo de Ising é um modelo de spins, localizados em uma rede, usualmente quadrada. O modelo estudado por Ising consistia de variáveis clássicas (numeros reais). A motivação para tal construção se dá no fato de que, para spins-1/2, o momento angular spin projetado em uma direção só pode assumir dois valores; paralelo ou anti-paralelo à direção em

questão [17]. Sendo assim, a energia de um spin σ na presença de uma campo magnética \mathbf{B} é dada por [5]

$$-\sigma \cdot \mathbf{B} \propto \begin{cases} -|\mathbf{B}|, & \text{para } \sigma \parallel \mathbf{B} \\ +|\mathbf{B}|, & \text{para } \sigma \not\parallel \mathbf{B} \end{cases},$$

a qual pode ser simplificada escrevendo-se

$$-\sigma B, \quad \sigma = \pm 1.$$

A interação entre dois spins, por sua vez, se dá pelo que se chama *interação de troca*¹, um efeito quântico devido a simetria, ou anti-simetria, de troca do estado quântico de um sistema de partículas idênticas [18, 19]. Em termos matemáticos, a energia associada a essa interação é

$$-J_x \sigma_1^x \sigma_2^x - J_y \sigma_1^y \sigma_2^y - J_z \sigma_1^z \sigma_2^z,$$

onde J_α são constantes que ditam a interação dos spins nas direções x , y e z .

O modelo de Ising considera a simplificação $J_x \sim J_y \sim 0$ [1, 3]. Sendo assim, o modelo é ditado por uma Hamiltoniana de termos comutantes cujos valores são discretos (efetivamente, clássicos). Essa tem a forma [4, 5]

$$H_{\text{Ising}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i B_i \sigma_i, \quad (4)$$

com

$$\sigma_i \in \{-1, +1\},$$

e as constantes J e B são adaptadas para terem dimensão de energia. Para um modelo ferromagnético, $J > 0$ (menor energia para spins alinhados); para um modelo anti-ferromagnético, $J < 0$.

Os subscriptos em σ_i denotam o *sítio* da rede ao qual o spin está associado. Para duas dimensões, por exemplo, $i = (i_1, i_2)$. A Figura 1 exemplifica nossa ideia de uma rede quadrada, em duas dimensões.

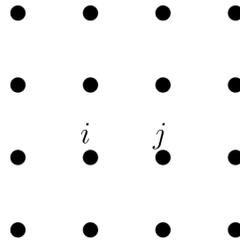


Figura 1: Exemplo de uma rede quadrada em duas dimensões. Adaptado de [20]

Para terminar de fixar nomes e notação, denominamos uma *configuração de spins* por $\{\sigma\}$.

2.2 O Modelo Quântico

Para o trabalho em questão, nos importa um modelo bidimensional, com uma anisotropia entre as direções verticais e horizontais (Figure 1), na ausência de um campo magnético. Nestas condições, o sistema é descrito pela Hamiltoniana

$$H_{2D} = - \sum_{i,j} [J_x \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + J_y \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}]; \quad J_x \neq J_y. \quad (5)$$

Com um pouco de análise, pode-se mapear a função de partição canônica da Hamiltoniana (5) na função de partição Hamiltoniana quântica dada por [4, 13]

$$\hat{H}_\lambda = -J \sum_i [\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + \lambda \hat{\sigma}_i^x], \quad (6)$$

onde $\hat{\sigma}^x$ e $\hat{\sigma}^z$ são as matrizes de Pauli:

$$\hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

¹A interação de troca surge da tentativa do sistema minimizar a repulsão coulombiana. Uma breve explicação pode ser encontrada no Apêndice A.

O fator λ que aparece na Hamiltoniana \hat{H}_λ do modelo quântico é o parâmetro que mede as flutuações quânticas. À temperatura $T = 0$, os spins tendem a se alinhar em uma direção. O termo $\sum \lambda \hat{\sigma}_i^x$ insere uma probabilidade de tunelamento entre ambos os estados de alinhamento, para cada spin. Para $\lambda = 0$, as flutuações desaparecem. No limite $\lambda \gg 1$, as flutuações são elevadas, destruindo o alinhamento na direção z^2 . Nesse sentido, o parâmetro λ se assemelha à temperatura do modelo clássico. De fato, na seção 5 mostraremos que as flutuações quânticas serão mapeadas nas flutuações clássicas e que λ está relacionado com a temperatura de tal maneira que

$$T = T_c \text{ (modelo clássico)} \Leftrightarrow \lambda = \lambda_c \text{ (modelo quântico)},$$

onde λ_c é o valor para o qual se ocorre a transição quântica de fase no modelo de Ising quântico³.

O procedimento para tal mapeamento consiste em identificar a direção vertical do modelo clássico como uma dimensão de tempo imaginário. Sendo assim, cada linha do modelo clássico denota um instante temporal do modelo quântico. Fazendo tal identificação, o limite do contínuo é tomado na direção temporal. No entanto, tal limite é feito de uma forma muito específica de modo a preservar as características da transição de fase do modelo clássico para o modelo quântico. Isso é feito preservando os expoentes críticos que aparecem nas leis de potência que descrevem certas quantidades na região de criticalidade. Em tal caso, diz-se que os modelos pertencem a mesma *classe de equivalência*. A anisotropia é necessária por causa desta forma controlada de se tomar o limite do contínuo na direção vertical do modelo. Os detalhes podem ser encontrados na referência [4].

Na seção 5, faremos o procedimento inverso; isto é, partiremos da equação (6) para chegar em (5). Este procedimento nos permitira mapear observáveis do modelo quântico unidimensional em observáveis do modelo clássico, os quais poderão ser obtidos por simulação computacional [15].

2.3 Uma digressão sobre Mecânica Estatística e Termodinâmica

O estudo de sistemas magnéticos requer um entendimento de Mecânica Estatística e de Termodinâmica. Nesta seção, faremos uma digressão sobre conceitos importantes dessas áreas a fim de deixar o trabalho mais auto-contido. Na necessidade de um aprofundamento, as referências [5, 22, 15, 23, 24] se fazem suficientes.

No estudo de Mecânica Estatística, existem três *ensembles estatísticos* que são importantes e usuais. Um desses é o *ensemble canônico*, construído a partir de um sistema acoplado a um reservatório térmico. Para este ensemble, o número total de constituintes N , o volume V do sistema e a temperatura T são considerados grandezas constantes. Por conta disso, este ensemble é usualmente adotado para o estudo de sistemas magnéticos.

Um sistema clássico em um ensemble canônico segue a *distribuição de Gibbs*, dada por [5]

$$P(H) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}; \quad \beta = \frac{1}{kT}, \quad (7)$$

onde H é a energia de uma dada configuração em que o sistema pode estar, k é a constante de Boltzmann, $P(H)$ é a probabilidade de se encontrar o sistema com energia H , $e^{-\beta H}$ é chamado *peso de Boltzmann* e

$$Z = \sum_{\{H\}} e^{-\beta H}$$

é chamada *função de partição canônica*, dada pela soma sobre todas as configurações de energia, $\{H\}$, possíveis do sistema do peso de Boltzmann da configuração.

Pode-se mostrar que a função de partição canônica está relacionada com uma grandeza termodinâmica conhecida como *energia livre de Helmholtz*, F , por [22, 5]

$$F = -kT \ln Z.$$

A importância disso reside no fato de que F é uma função de estado, contendo, portanto, toda a informação termodinâmica do sistema [22]. Sendo assim, a função de partição é a entidade da qual podemos obter toda a informação do sistema.

²Com essa ideia, pode parecer natural que deva haver uma transição de fase para o modelo. No entanto, a energia de se flipar um spins ou flipar uma cadeia de spins adjacentes é exatamente a mesma; a diferença de energia se deve apenas à parede de domínio. Isso faz com que uma pequena elevação na energia possa resultar em uma grande elevação na entropia, contribuindo para a redução da energia livre de Helmholtz. Este argumento é a explicação para a não existência de uma transição de fase no modelo **clássico** em uma dimensão. Logo, não é tão trivial que haja uma transição de fase.

³Para o leitor não familiarizado com transições quânticas de fase, ressaltamos os seguintes pontos: 1) são transições devido a *flutuações quânticas*, em contraste com transições de fase *térmicas* estudadas em sistemas clássicos, 2) ocorrem a temperatura zero e por conta disso 3) o parâmetro que descreve a transição não é a temperatura, mas um parâmetro que mede as flutuações quânticas. Para maiores detalhes sobre transição quântica de fase, nos referimos a [21].

Para sistemas quânticos, o análogo da distribuição de Gibbs é a matriz densidade do ensemble canônico quântico, dada por [15, 23]

$$\hat{\rho}_{\text{can.}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}},$$

onde \hat{H} é a Hamiltoniana do sistema quântico.

Usando que $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$, verifica-se que

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}, \quad (8)$$

para um sistema estatístico quântico.

Em especial, na base dos auto-estados, $\{|\lambda\rangle\}$ de \hat{H} ,

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \sum_{\lambda} \langle \lambda | e^{-\beta \hat{H}} | \lambda \rangle = \sum_{\lambda} e^{-\beta E_{\lambda}}.$$

O caso contínuo pode ser facilmente obtido pelo mesmo procedimento [23].

2.3.1 Calculando-se observáveis a partir da função de partição

Partindo da função de partição do sistema, pode-se obter qualquer grandeza termodinâmica que se desejar, por exemplo a energia média, a magnetização, o valor esperado de um observável quântico. O procedimento é costumeiramente o mesmo.

Para se determinar a energia média, por exemplo, fazemos

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_{\{E\}} EP(E); \\ &= \sum_{\{E\}} E \frac{e^{-\beta E}}{Z}; \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\{E\}} -\frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E}; \end{aligned}$$

de onde obtemos

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}. \quad (9)$$

De maneira similar, podemos obter outras grandezas.

Para o cálculo de um observável quântico, o procedimento é similar. Por exemplo, para calcular $\langle \hat{\sigma}^z \rangle = \langle \hat{\sigma}_i^z \rangle$, fazemos o seguinte:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\sigma}_i^z \rangle &= \text{Tr}(\hat{\sigma}_i^z \hat{\rho}); \\ &= \sum_{\lambda} \langle \lambda | \hat{\sigma}_i^z \hat{\rho} | \lambda \rangle; \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\lambda} \langle \lambda | \hat{\sigma}_i^z e^{-\beta \hat{H}} | \lambda \rangle; \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\lambda} \left\langle \lambda \left| -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} e^{-\beta(\hat{H} + \mu \hat{\sigma}_i^z)} \right|_{\mu=0} \right\rangle; \end{aligned}$$

chegando à expressão

$$\langle \hat{\sigma}_i^z \rangle = \frac{1}{Z} \times \left[-\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{\lambda} \left\langle \lambda \left| e^{-\beta(\hat{H} + \mu \hat{\sigma}_i^z)} \right|_{\mu=0} \right\rangle \right]. \quad (10)$$

Vê-se que a expressão (10) é um pouco mais complicada, dependendo da dificuldade de se calcular $\left\langle \lambda \left| e^{-\beta(\hat{H} + \mu \hat{\sigma}_i^z)} \right|_{\mu=0} \right\rangle$, porém, é o caso mais geral. Esta será a expressão utilizada no mapeamento de observáveis quânticos em clássicos.

A conclusão em que chegamos é que, para o estudo de um sistema estatístico, seja clássico ou quântico, precisamos determinar a função de partição. Essa é uma tarefa complicada, em geral; o Modelo de Ising é um exemplo disso, como pode ser visto na solução exata para duas dimensões [10].

Sendo assim, métodos numéricos são uma ferramenta fundamental para se trabalhar com mecânica estatística.

3 Amostrando-se o Espaço de Fase e Calculando-se Médias

De forma teórica, o valor médio de um observável quântico ou clássico é dado, respectivamente, por

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \frac{1}{Z} \sum_{\lambda} \langle \lambda | \hat{A} | \lambda \rangle e^{-\beta E_{\lambda}}, \\ \langle K \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\{E\}} K(\{E\}) e^{-\beta E}.\end{aligned}$$

Claramente, um método de se calcular os valores médios acima seria visitar cada configuração do sistema, calcular a quantidade de interesse e sua probabilidade, e efetuar a soma. Uma primeira forma aproximada seria sortear configurações baseadas na distribuição de Gibbs e realizar o cálculo. No entanto, como o número de configurações é muito grande (2^N para o Modelo de Ising, onde N é o número de spins), este método não irá funcionar porque a probabilidade de se sortear uma configuração de forma aleatória que seja aceita é muito pequena [15].

Frente a este problema, surge a necessidade de se utilizar um processo que permita amostrar as configurações “mais importantes”, com ocasionais visitas às “menos importantes” [15]. Para determinar e justificar tal procedimento, faz-se necessário entender algumas ideias acerca de *cadeias de Markov* e *cadeias ergódicas*.

3.1 Cadeias de Markov e cadeias Ergódicas

Considere uma sequência de variáveis aleatórias $\Gamma = (\Gamma_1, \Gamma_2, \dots)$, que toma valores no conjunto de possíveis configurações de um sistema, $\{x_1, \dots, x_M\}$, onde Γ_n representa o estado do sistema no tempo n ; dizemos, por exemplo, que no tempo n o estado do sistema é x_k se $\Gamma_n = x_k$. Se, para qualquer instante do tempo em que o sistema esteja na configuração x_i , existir uma probabilidade *fixa* $P(i \rightarrow j) = P_{ij}$ de o sistema se encontrar na configuração x_j , no tempo seguinte, diz-se que a sequência Γ é uma *cadeia de Markov* [25];

$$P(\Gamma_{n+1} = x_j | \Gamma_n = x_i) =: P_{ij}.$$

$P_{ij} = P(i \rightarrow j)$ recebe o nome de probabilidade de transição.

De forma similar, define-se a probabilidade de transição entre n estados, $P_{ij}^{(n)}$, como

$$P_{ij}^{(n)} := P(\Gamma_{m+n} = x_j | \Gamma_m = x_i).$$

Se $P_{ij}^{(n)} > 0$, para todo n e para todo par (x_i, x_j) , diz-se que Γ é uma *cadeia ergódica* [25].

Um resultado importante que decorre é o seguinte [25]:

Teorema 1 *Para uma cadeia de Markov ergódica, o limite*

$$\pi_j = \lim_{n \rightarrow \infty} P_{ij}^{(n)}$$

existe e $\pi_j, 0 \leq j \leq M$ são as únicas soluções não negativas de

$$\begin{cases} \pi_j = \sum_{k=0}^M \pi_k P_{kj}, \\ \sum_{k=0}^M \pi_k = 1. \end{cases}$$

A existência do limite acima significa que para grandes valores de n , a probabilidade de o sistema se encontrar no estado j é π_j , independentemente do estado inicial do sistema. Isso é exatamente o que se espera de um sistema termodinâmico em equilíbrio (o que se chama de hipótese ergódica, na Mecânica Estatística) [5, 24]. No que se segue, identificaremos os conceitos apresentados com a teoria da Mecânica Estatística e o modelo de Ising.

Para determinar o processo de amostragem que buscamos, no entanto, precisamos de um último resultado, conhecido como Teorema Ergódico. Alguns conceitos de *teoria da medida e integração* são importantes para o entendimento completo do Teorema. Buscaremos definir algumas ideias de forma simples para entender o significado do Teorema.

Seja X um conjunto não vazio, $\mathcal{P}(X)$ o conjunto das partes de X , e $\Sigma \subset \mathcal{P}(X)$ um conjunto tal que [26]

1. $X \in \Sigma$;

2. se $A \in \Sigma$, então $X \setminus A \in \Sigma$;
3. se $A_1, \dots, A_n \in \Sigma$, então, $\cup_{i=1}^n A_i \in \Sigma$,

chama-se um *espaço mensurável* a dupla (X, Σ) .

O mapa $\mu: \Sigma \rightarrow I \subset \mathbb{R}$ satisfazendo [26]

1. $\mu(A) \geq 0, \quad \forall A \in \Sigma$;
2. $\mu(\emptyset) = 0$;
3. $\mu(\cup_{i=1}^n A_i) = \sum_{i=1}^n \mu(A_i)$

é chamado uma *medida*. Em especial, se $I = [0, 1]$, μ é chamado medida de probabilidade. (X, Σ, μ) chama-se *espaço de medida*.

Por fim, chama-se uma transformação que preserva medida, T , a aplicação [26] $T: (X, \Sigma) \rightarrow (X, \Sigma)$ tal que

$$\mu(T^{-1}(A)) = \mu(A), \quad \forall A \in \Sigma,$$

onde T^{-1} é a transformação inversa.

Conderando a integral de Lebesgue, podemos enunciar o Teorema Ergódico [26].

Teorema 2 (Teorema Ergódico): *Seja (X, Σ, μ) um espaço de medida, $T: (X, \Sigma) \rightarrow (X, \Sigma)$ uma transformação que preserva a medida e f uma função μ -integrável, então, as seguintes médias são iguais:*

$$\text{Média temporal: } \bar{f} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f(T^k(x)),$$

$$\text{Média espacial: } \langle f \rangle = \frac{1}{\mu(X)} \int f \, d\mu.$$

Nota: $T^k(x)$ denota k iterações da transformação T sobre o estado inicial x .

O teorema acima nos diz que a média de uma quantidade f dada pela integral no espaço de fase, sobre a medidade de probabilidade do espaço mensurável se iguala a média obtida por meio da amostragem temporal, segundo a transformação T , quando o número amostral se torna muito grande. Isso nos permite calcular a média no espaço de fase por meio de um processo dinâmico: dado um estado inicial do sistema e uma transformação T , nas condições do teorema, basta calcular a média aritmética da quantidade desejada, sobre a sequência de transformações $\{x, T(x), T^2(x), \dots, T^M(x)\}$, para M muito grande, como uma estimativa para $\langle f \rangle$.

O que garante que a aplicação sucessiva de T levará ao resultado correto, é o teorema 1 apresentado, que garante que π_j independa do estado inicial x . Para garantir isso, é importante aplicar T diversas vezes ao estado inicial antes de se fazer a amostragem que será utilizada para calcular a média temporal.

3.1.1 Aplicação a sistemas físicos

Um dos postulados da Mecânica Estatística é a hipótese ergódica, a qual diz que os sistemas físicos estatísticos realizam um movimento ergódico no espaço de fases; isto é, microestados de igual energia tem igual probabilidade, *a priori* [5]. O ensemble microcanônico é derivado dessa hipótese. Para o trabalho em questão, voltamos nossa atenção para o Teorema 2.

O Teorema Ergódico nos fornece o procedimento que buscavamos para a determinação dos valores esperados: Dada uma configuração inicial do sistema, $\{\sigma\}$ e uma lei de transformação T , o valor esperado de um observável K é

$$\langle K \rangle \approx \langle K \rangle_M = \frac{1}{M} \sum_{j=0}^{M-1} K(T^j(\{\sigma\})). \quad (11)$$

Como dito anteriormente, para garantir a validade do Teorema 1, aplicamos T ao estado inicial sucessivas vezes antes de começar a amostagem para \bar{K} . Esse procedimento é conhecido como *termalização*, em simulações de sistemas termodinâmicos [15].

4 Método de Monte Carlo e o Algoritmo de Metropolis

O Método de Monte Carlo consiste em realizar cálculos por meio de amostragem estatística, fazendo uso de distribuições de probabilidades. O algoritmo consiste em sortear, um grande número de vezes, estados possíveis do sistema/problem em questão e determinar as quantidades de interesse de forma estatística [14].

A amostragem de configurações necessárias para a aplicação do método de Monte Carlo pode ser realizada pelo chamado *algoritmo de Metropolis*. Este algoritmo é uma forma de se obter uma sequência markoviana de configurações do sistema a partir da distribuição de probabilidade [14]. No que se segue trataremos primeiramente do algoritmo de Metropolis e em seguida do de Monte Carlos.

4.1 O Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis pode ser descrito da seguinte forma [14]: Seja $\Gamma = (x_0, \dots, x_t, \dots)$ uma sequência de configurações do sistema,

1. Escolhe-se um estado inicial, x_0 , um conjunto de probabilidades de transição $\{W(y \rightarrow z)\}_{y,z}$ e uma lei de transformação T para o sistema;
2. Para cada iteração t :
 - 2.1 Gera-se uma nova configuração $x' = T(x_{t-1})$;
 - 2.2 Calcula-se a taxa de aceitação $W(x_{t-1} \rightarrow x')$;
 - 2.3 Aceita-se ou rejeita-se a adição da configuração x_t à sequência Γ de configurações da seguinte maneira:
 - * Sorteia-se um número aleatório $r \in [0, 1]$
 - * se $r \leq W(x_{t-1} \rightarrow x')$, *aceita-se* a nova configuração x' fazendo $x_t = x'$
 - * se $r > W(x_{t-1} \rightarrow x')$, *rejeita-se* a configuração x' fazendo $x_t = x_{t-1}$

A convergência e funcionalidade dos algoritmos de Monte Carlo de Metropolis é garantida pela lei dos grandes números [25].

4.2 Amplitude de transição

Para a implementação do algoritmo de Metropolis descrito acima precisamos determinar uma equação para a amplitude de transição e uma lei de transformação do sistema.

No caso de spins de Ising, a lei de transformação é simplesmente *flipar* o spin em uma posição aleatória; $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$ [15, 14].

A amplitude de transição pode ser obtida da *equação markoviana mestra* [15],

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \sum_j [P_j(t)W(j \rightarrow i) - P_i(t)W(i \rightarrow j)], \quad (12)$$

juntamente com alguns hipóteses físicas: invariância sob reversão temporal (equação (14)) e minimização da energia (equação (16)). Na equação (12), $P_i(t)$ é a probabilidade de se encontrar a configuração x_i no tempo t e $W(j \rightarrow i)$ é a amplitude de transição por unidade de tempo de o sistema ir da configuração x_j para x_i .⁴ O primeiro termo da equação quantifica a taxa na qual o estado x_i está sendo populado, enquanto que o segundo, a taxa de despopulação. A Física do problema, como pode ser esperado pelo algoritmo citado acima, está contida totalmente nos termos $W(i \rightarrow j)$ [15].

Em vista do teorema 1 e da distribuição de Gibbs, espera-se que

$$P_i(t \rightarrow \infty) \rightarrow P_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(x_i)}.$$

Além disso, como esperamos que o sistema seja markoviano e ergódico, $W(i \rightarrow j) > 0$ não deve depender do tempo e apenas depender das configurações x_i e x_j , sem depender do que acontece antes da configuração x_i [15, 25].

Com a condição $P_i(t \rightarrow \infty) \rightarrow P_i$, temos que $dP_i/dt = 0$, o que nos leva a

$$\sum_j P_j W(j \rightarrow i) = \sum_j P_i W(i \rightarrow j). \quad (13)$$

⁴Utilizamos a notação $x_j = \{\sigma_j\}$ por conveniência.

Esta condição não é simples de se implementar pela soma sobre todas as configurações. Existe, no entanto, uma hipótese física que é uma condição suficiente para (13), que se traduz na *equação de balanço detalhado* [15]:

$$P_j(t)W(j \rightarrow i) = P_i(t)W(i \rightarrow j). \quad (14)$$

A condição acima é uma *consequência da invariância sob reversão temporal*, o que é esperado no equilíbrio termodinâmico e para uma cadeia de Markov [15, 25], e automaticamente satisfaz (13).

Podemos agora definir a amplitude de transição, a qual deve satisfazer

$$\frac{W(i \rightarrow j)}{W(j \rightarrow i)} = \frac{P_j}{P_i} = e^{-\beta(E_j - E_i)}, \quad (15)$$

onde $E_i = E(x_i) = E(\{\sigma_i\})$.

Seguindo a ideia de minimização da energia e maximização da entropia, a amplitude de transição é comumente definida segundo a escolha de Metropolis [15, 14]:

$$W(i \rightarrow j) = \begin{cases} 1, & \text{se } (E_j \leq E_i); \\ e^{-\beta(E_j - E_i)}, & \text{se } (E_j > E_i). \end{cases} \quad (16)$$

Note que, pelo algoritmo de Metropolis e pela amplitude de transição definida acima, pode ocorrer de ser aceita uma configuração que aumenta a energia; isso é necessário para contabilizar as flutuações térmicas; o papel da entropia na minimização da energia livre de Helmholtz.

4.3 O algoritmo de Monte Carlo

O algoritmo de Monte Carlo, nomeado em referência ao famoso cassino de mesmo nome, em Monaco, consiste em uma amostragem aleatória, a qual será feita por meio do algoritmo de Metropolis [25].

O método pode ser sintetizado da seguinte forma [25, 14]:

1. Escolhe-se um conjunto de quantidades (observáveis físicos) para de calcular a média;
2. Escolhe-se uma configuração inicial aleatória;
3. Roda-se o algoritmo de Metropolis um grande número de vezes para construir a sequência de configurações $\Gamma = (x_0, \dots, x_f)$;
4. Partindo da configuração final, calcula-se as quantidades de interesse $\{A_1(x_f), \dots, A_n(x_f)\}$;
5. Repete-se, a partir do passo 2, um número M de vezes até um critério de parada determinado;
6. Obtido o conjunto $\{A_i(x_{f_1}), \dots, A_i(x_{f_M})\}_{i=1}^n$, calculam-se os valores esperados $\langle A_i \rangle_M$ aplicando a equação (11).

É importante dizer que o cálculo de uma dada quantidade $A_i(x_f)$, após a aplicação do algoritmo de Metropolis, pode ser realizada ajustando-se os valores dos A_i ao final da adição de cada configuração na sequência Γ bem como ao final de todo o passo de Metropolis. A escolha de qual abordagem utilizar depende de quão custoso é cada uma; em alguns casos, o cálculo do observável ao final requer mais passos do que ajustá-lo enquanto Γ é gerada, em outros, é o oposto.

4.4 Termalização e critério de parada

Os únicos pontos restante para a implementação dos algoritmos são a etapa de termalização, já citada anteriormente, e o critério de parada.

Como já foi apresentado, a ideia central da simulação por meio do método de Monte Carlo é amostrar o conjunto de microestados que compõem o equilíbrio termodinâmico. No entanto, o estado inicial, escolhido aleatoriamente, em geral não será um elemento do ensemble de equilíbrio. Portanto, antes de se realizar medições de observáveis é necessário aplicar um número apropriado de transformações. Este procedimento é chamado *termalização* e sua interpretação pode ser vista como o limite no teorema 1 [15, 24].

Um número adequado de passos no processo de termalização pode ser obtido estudando-se a *função de autocorrelação* de um observável A definida por [15, 24]

$$C_A(t) = \frac{\langle A(t)A(0) \rangle_M - \langle A(t) \rangle_M \langle A(0) \rangle_M}{\langle A(0)^2 \rangle_M - \langle A(0) \rangle_M^2}, \quad (17)$$

onde o argumento t de A é uma medida da separação entre pares de separação na sequência Γ e é comumente chamado de tempo.

Os valores esperados em (17) podem ser calculados de subsequências de Γ como [24]

$$\langle A(t)A(0) \rangle_M \approx \frac{1}{M'} \sum_{j=0}^{M'-1} A(x_{j+t})A(x_j)$$

e

$$\langle A(t) \rangle_M \approx \frac{1}{M'} \sum_{j=0}^{M'-1} A(x_{j+t}).$$

O tempo de correlação da quantidade A , τ , é definido como [24, 15]

$$\tau = \sum_{t>0} C_A(t) \quad \text{ou} \quad C_A(t) \sim e^{-t/\tau}.$$

Sendo assim, o tempo τ é o tempo para a correlação cair de e^{-1} .

Determinado o tempo de correlação de uma certa quantidade, uma abordagem para determinar um número suficiente de passos de termalização é $k \cdot \tau$, onde k é escolhido para que $C_A(k\tau) \sim e^{-k}$ é menor do que um erro escolhido.

Um segundo motivo por trás da importância do tempo de correlação é a estimativa do erro das medidas, dada por [24]

$$\sigma_A = \sqrt{\frac{\langle A^2 \rangle_M - \langle A \rangle_M^2}{M/(2\tau + 1)}}; \quad \langle A \rangle = \langle A \rangle_M \pm \sigma_A \quad (18)$$

onde M é o número de valores utilizados no cálculo das médias.

Um critério de parada para o algoritmo de Monte Carlo pode ser escolhido como quando σ_A é menor do que um determinado limite, determinando um valor para M .

Custo computacional

O estudo de sistemas termodinâmicos faz parte da classe de problemas NP-completo [16]. Métodos probabilísticos, como Monte Carlo, são uma abordagem para esses problemas buscando melhores performances, uma vez que não se sabe se seria possível encontrar um método rápido para trabalhar com problemas de classe NP-completo.

O método descrito anteriormente consiste de M passos para o *loop* de Monte Carlo e K passos para o *loop* de Metropolis. Sendo assim, a complexidade temporal do método é $\mathcal{O}(MK)^5$.

O algoritmo de Metropolis requer o armazenamento apenas da configuração final em Γ para o cálculo dos observáveis. Sendo assim, pode ser feito com complexidade espacial (isto é, de armazenamento em memória) constante. Para cada um dos n observáveis, o algoritmo de Monte Carlo calcula M valores desses, de modo que ao total a complexidade espacial é $\mathcal{O}(nM)^6$.

5 Mapeamento de observáveis quânticos em observáveis clássico

Nesta seção, apresentaremos a técnica do mapeamento clássico–quântico. Para tal, mostraremos o mapeamento do observável $\langle \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z \rangle$ e da função de partição do modelo de Ising quântico unidimensional em grandezas do modelo clássico bidimensional. O procedimento pode ser generalizado de forma direta para outros observáveis de interesse.

Com estes observáveis, seremos capazes de estudar o modelo quântico utilizando o método de Monte Carlo para simular o modelo clássico. Em especial, poderemos estudar alguns funcionais de Bell e a desigualdade de Bell na transição de fase do modelo.

A técnica do mapeamento clássico–quântico tem seu coração na *fórmula produto de Lie-Trotter*:

⁵A complexidade temporal nos permite, por exemplo, determinar o tempo necessário para uma simulação e fazer comparações com outras alternativas.

⁶A complexidade espacial nos permite conhecer o consumo de memória. Isso se torna importante em grandes simulações e trabalhos com um volume elevado de dados onde pode ocorrer de não haver espaço total na memória, às vezes requerindo adaptações na abordagem computacional.

Teorema 3 Para todo $X, Y \in M_n(\mathbb{C})$, tem-se [27]

$$e^{X+Y} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{X}{n}} e^{\frac{Y}{n}} \right)^n. \quad (19)$$

O teorema 3 pode ser utilizado para a separação de soma de operadores não comutantes. Sua importância e aplicação será explicitada no que se segue.

Para determinar o valor esperado de um observável \hat{A} , devemos calcular o seguinte traço:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}} \hat{A} \right).$$

A aplicação da fórmula produto de Lie-Trotter requer que o operador \hat{A} seja escrito em uma exponencial. Expandindo em Taylor, pode-se facilmente mostrar que

$$-\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} e^{-\beta(\hat{H} + \mu \hat{A})} \Big|_{\mu=0} = \hat{A} e^{-\beta \hat{H}}, \quad (20)$$

de tal forma que

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}} \right) &= -\frac{1}{\beta} \sum_{\lambda} \left\langle \lambda \left| \frac{\partial}{\partial \mu} e^{-\beta(\hat{H} + \mu \hat{A})} \Big|_{\mu=0} \right| \lambda \right\rangle, \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{\lambda} \langle \lambda | e^{-\beta(\hat{H} + \mu \hat{A})} | \lambda \rangle \Big|_{\mu=0}, \end{aligned}$$

ou, de forma resumida,

$$\text{Tr} \left(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}} \right) = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Tr} \left(e^{-\beta(\hat{H} + \mu \hat{A})} \right) \Big|_{\mu=0} \quad (21)$$

Utilizando o teorema 3, podemos separar a exponencial presente na última expressão. Por meio desta separação, será possível identificar a relação do resultado final com o modelo clássico.

5.1 Mapeando-se a função de partição

Aplicaremos as ideias apresentadas no começo da seção para estudar a função de partição

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}.$$

Iniciando escrevendo a Hamiltoniana de Ising na forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1,$$

com

$$\hat{H}_0 = -\sum_i \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z, \quad \hat{H}_1 = -\lambda \sum_i \hat{\sigma}_i^x. \quad (22)$$

Pelo teorema 3,

$$e^{-\beta \hat{H}} = \lim_{L \rightarrow \infty} \left[e^{-\delta \tau \hat{H}_1} e^{-\delta \tau \hat{H}_0} \right]^L; \quad \delta \tau = \beta/L.$$

Com isso, o traço da função de partição toma a forma

$$Z = \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\{\sigma_i^z\}} \left\langle \sigma_1^z, \dots, \sigma_N^z \left| \prod_{j=1}^L e^{-\delta \tau \hat{H}_1} e^{-\delta \tau \hat{H}_0} \right| \sigma_1^z, \dots, \sigma_N^z \right\rangle$$

Sendo \mathcal{O} um operador qualquer, utilizando a relação de completeza

$$\mathbb{I} = \sum_{\{\sigma_i\}} |\{\sigma_i\}\rangle \langle \{\sigma_i\}|,$$

podemos escrever

$$\begin{aligned}
\sum_{\{\sigma_i^z\}} \left\langle \{\sigma_i^z\} \left| \prod_{j=1}^L \mathcal{O} \right| \{\sigma_i^z\} \right\rangle &= \sum_{\{\sigma_i^z\}} \left\langle \{\sigma_i^z\} \left| \underbrace{\mathcal{O} \mathcal{I} \mathcal{O} \mathcal{I} \dots \mathcal{O} \mathcal{I} \mathcal{O}}_{L \text{ vezes}} \right| \{\sigma_i^z\} \right\rangle; \\
&= \sum_{\{\sigma_{i,L}^z\}} \sum_{\{\sigma_{i,L-1}^z\}} \dots \sum_{\{\sigma_{i,1}^z\}} \langle \{\sigma_{i,L}^z\} | \mathcal{O} | \{\sigma_{i,L-1}^z\} \rangle \langle \{\sigma_{i,L-1}^z\} | \mathcal{O} | \{\sigma_{i,L-2}^z\} \rangle \times \\
&\quad \times \langle \{\sigma_{i,L-2}^z\} | \mathcal{O} | \{\sigma_{i,L-3}^z\} \rangle \dots \langle \{\sigma_{i,1}^z\} | \mathcal{O} | \{\sigma_{i,L}^z\} \rangle; \\
&= \sum_{\{\sigma_{i,j}^z\}} \left[\prod_{j=0}^{L-1} \langle \{\sigma_{i,j+1}^z\} | \mathcal{O} | \{\sigma_{i,j}^z\} \rangle \right]; \quad \text{com } |\{\sigma_{i,0}^z\}\rangle := |\{\sigma_{i,L}^z\}\rangle.
\end{aligned}$$

Note que o surgimento do segundo índice em $\{\sigma_{i,j}^z\}$ é devido a necessidade de distinguir entre as diferentes identidade inseridas entre os operadores \mathcal{O} . O leitor familiarizado com o formalismo de integrais de caminho pode perceber que este último passo é essencialmente o mesmo que é feito na derivação da integral de trajetória.

Utilizando este resultado, a função de partição pode ser escrita como

$$Z = \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\{\sigma_{i,j}^z\}} \left[\prod_{j=0}^{L-1} \langle \{\sigma_{i,j+1}^z\} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} e^{-\delta\tau \hat{H}_0} | \{\sigma_{i,j}^z\} \rangle \right].$$

Como $|\{\sigma_{i,j}^z\}\rangle$ é a base de auto-estados de $\hat{\sigma}^z$, a ação de $e^{-\delta\tau \hat{H}_0}$ sobre essa é trivial:

$$e^{-\delta\tau \hat{H}_0} |\{\sigma_{i,j}^z\}\rangle = e^{\delta\tau \sum_{i=1}^N \sigma_{i,j}^z \sigma_{i+1,j}^z} |\{\sigma_{i,j}^z\}\rangle.$$

Assim,

$$\langle \{\sigma_{i,j+1}^z\} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} e^{-\delta\tau \hat{H}_0} | \{\sigma_{i,j}^z\} \rangle = e^{\delta\tau \sum_{i=1}^N \sigma_{i,j}^z} \langle \{\sigma_{i,j+1}^z\} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} | \{\sigma_{i,j}^z\} \rangle$$

Para o termo restante, lembrando que

$$e^{k\hat{\sigma}^x} = e^k |x, +1\rangle \langle x, +1| + e^{-k} |x, -1\rangle \langle x, -1|,$$

com

$$|x, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [| +1\rangle + | -1\rangle], \quad |x, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [| +1\rangle - | -1\rangle],$$

onde $\{| +1\rangle, | -1\rangle\}$ é a base de $\hat{\sigma}^z$, temos que

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_{i,j+1} | e^{k\hat{\sigma}^x} | \sigma_{i,j} \rangle &= e^k \langle \sigma_{i,j+1} | x, +1\rangle \langle x, +1 | \sigma_{i,j} \rangle + e^{-k} \langle \sigma_{i,j+1} | x, -1\rangle \langle x, -1 | \sigma_{i,j} \rangle; \\
&= \frac{e^k + (\sigma_{i,j+1} \sigma_{i,j}) e^{-k}}{2}.
\end{aligned}$$

Deste resultado, vemos que $\langle \sigma_{i,j+1} | e^{k\hat{\sigma}^x} | \sigma_{i,j} \rangle$ é igual a $\cosh(k)$ quando o produto dos σ 's é igual a 1 e $\sinh(k)$ quando o produto é igual a -1 . Um forma de reescrever isso é a seguinte:

$$\begin{cases} \sqrt{\cosh(k) \sinh(k)} \sqrt{\coth(k)}, & \text{se } \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1} = 1, \\ \sqrt{\cosh(k) \sinh(k)} \sqrt{\tanh(k)}, & \text{se } \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1} = -1, \end{cases}$$

o que nos permite chegar à forma mais compacta,

$$\Lambda e^{\gamma \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}},$$

com

$$\Lambda = \sqrt{\cosh(k) \sinh(k)}, \quad \gamma = -\ln[\tanh(k)].$$

Fazendo uso da última representação,

$$\langle \sigma_{i,j+1} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} | \sigma_{i,j} \rangle = \prod_{i=1}^N \langle \sigma_{i,j+1} | e^{\delta\tau \lambda \hat{\sigma}_i^x} | \sigma_{i,j} \rangle \Lambda e^{\gamma \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}} = \Lambda^N e^{\gamma \sum_{i=1}^N \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}},$$

onde agora,

$$\Lambda = \sqrt{\cosh(\delta\tau\lambda) \sinh(\delta\tau\lambda)}, \quad \gamma = -\ln[\tanh(\delta\tau\lambda)]$$

Finalmente, juntando os resultados, a função de partição fica

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\{\sigma_{i,j}^z\}} \left[\prod_{j=0}^{L-1} \Lambda^N e^{\delta\tau \sum_{i=1}^N \sigma_{i,j}^z e^{\sum_{i=1}^N \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}}} \right] \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \Lambda^{NL} \sum_{\{\sigma_{i,j}^z\}} \exp \left\{ \delta\tau J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^L [\sigma_{i,j}^z \sigma_{i+1,j}^z + \gamma \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}] \right\} \end{aligned}$$

A comparação do resultado acima com a função de partição da Hamiltoniana clássica (5),

$$Z_{\text{cl}} = \sum_{\{\sigma_{i,j}\}} \exp \left\{ \beta_{\text{cl}} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} [J_x \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + J_y \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}] \right\},$$

sugere fazer a analogia

$$\begin{aligned} \delta\tau J &= \beta_{\text{cl}} J_x, & N &= N_x; \\ \gamma \delta\tau J &= \beta_{\text{cl}} J_y, & L &= N_y, \end{aligned}$$

onde β_{cl} denota o inverso da temperatura para o modelo clássico. Para isso, é necessário identificar o segundo índice, que surgiu como um artifício matemático para a distinção entre as relações de completudeza, como o rótulo em uma dimensão adicional.

A única questão a ser levantada para tal analogia é a presença do termo Λ^{NL} . Este termo, no entanto, não é importante, pois o mesmo aparece no cálculo do traço de $\text{Tr}(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}})$, de tal modo que se cancela no valor esperado $\langle \hat{A} \rangle$. Um exemplo será feito para o operador $\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z$.

Note que o fator γ está relacionado ao parâmetro λ que mede as flutuações quânticas e que este fator é justamente o que regula a anisotropia do modelo clássico. Como veremos na subseção 7.2, variar o fator γ causa uma variação na temperatura crítica do modelo clássico. Fixada uma temperatura, a variação do fator γ pode levar, eventualmente, a temperatura crítica se igualar a atual temperatura da rede, causando uma transição de fase. Indiretamente, isso é causado pela variação do parâmetro λ . Fica claro, portanto, a afirmação feita no final da seção 2 de que flutuações quânticas são mapeadas em flutuações térmicas por este procedimento.

5.2 Mapeando-se $\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z$

Nesta seção, utilizaremos o resultado da função de partição para o cálculo do valor esperado de $\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z$. O procedimento é semelhante ao da sub-subseção 5.1, agora aplicado à equação (21) para o operador $\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z$.

Como $|\{\sigma_{i,j}^z\}\rangle$ é um auto-estado de $\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z$;

$$e^{-\delta\tau \mu \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z} |\{\sigma_{i,j}^z\}\rangle = e^{-\delta\tau \mu \sigma_{k,j} \sigma_{l,j}} |\{\sigma_{i,j}^z\}\rangle,$$

o cálculo de $\text{Tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z)})$ é direto:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z)}) &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\{\sigma_{i,j}^z\}} \left[\prod_{j=0}^{L-1} \langle \{\sigma_{i,j+1}^z\} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} e^{-\delta\tau \hat{H}_0} e^{\delta\tau \mu \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z} | \{\sigma_{i,j}^z\} \rangle \right]; \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\{\sigma_{i,j}^z\}} \left[\prod_{j=0}^{L-1} e^{\delta\tau \mu \sigma_{k,j} \sigma_{l,j}} \langle \{\sigma_{i,j+1}^z\} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} e^{-\delta\tau \hat{H}_0} | \{\sigma_{i,j}^z\} \rangle \right]; \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \Lambda^{NL} \sum_{\{\sigma_{i,j}^z\}} \exp \left\{ \delta\tau \mu \sum_{j=1}^L \sigma_{k,j}^z \sigma_{l,j}^z + \delta\tau J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^L [\sigma_{i,j}^z \sigma_{i+1,j}^z + \gamma \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}] \right\}. \end{aligned}$$

Cont.

Com isso, lembrando que $\delta\tau = \beta/L$,

$$\begin{aligned} \text{Tr}\left(\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z e^{-\beta\hat{H}}\right) &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial\mu} \text{Tr}\left(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z)}\right)\Bigg|_{\mu=0} \\ &= \lim_{L\rightarrow\infty} \Lambda^{NL} \sum_{\{\sigma_{i,j}^z\}} \left\{ \left[\frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \sigma_{k,j}^z \sigma_{l,j}^z \right] \times \exp\left\{ \delta\tau J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^L [\sigma_{i,j}^z \sigma_{i+1,j}^z + \gamma \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}] \right\} \right\}, \end{aligned}$$

de onde encontramos, para $\langle \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z \rangle$,

$$\langle \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\left(\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z e^{-\beta\hat{H}}\right) = \lim_{L\rightarrow\infty} \frac{\sum_{\{\sigma_{i,j}^z\}} \left\{ \left[\frac{1}{L} \sum_{j=1}^L \sigma_{k,j}^z \sigma_{l,j}^z \right] \times \exp\left\{ \delta\tau J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^L [\sigma_{i,j}^z \sigma_{i+1,j}^z + \gamma \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}] \right\} \right\}}{\sum_{\{\sigma_{i,j}^z\}} \exp\left\{ \delta\tau J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^L [\sigma_{i,j}^z \sigma_{i+1,j}^z + \gamma \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}] \right\}}$$

Tomando-se o limite termodinâmico, e identificando as variáveis clássicas como sugerido no final da subseção 5.1, podemos escrever o resultado final como

$$\langle \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z \rangle = \left\langle \lim_{N_y \rightarrow \infty} \frac{1}{N_y} \sum_{j=1}^{N_y} \sigma_{k,j}^z \sigma_{l,j}^z \right\rangle_{\text{cl}}, \quad (23)$$

onde $\langle \rangle_{\text{cl}}$ significa o valor esperado do modelo de Ising clássico anisotrópico bidimensional (5). Interpretamos a equação (23) como a média sobre o ensemble do valor médio do produto dos spins nas colunas k e l , sobre todas as linhas. Seguindo as ideias apresentadas na seção 2, como o eixo vertical do modelo clássico é mapeado no eixo temporal do modelo quântico [4], a média sobre as colunas pode ser interpretada como uma média temporal.

Com uma simulação computacional da rede clássica, o valor esperado do lado direito da equação (23) pode ser calculado, permitindo-nos estimar $\langle \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z \rangle$.

Note que, como citado ao final da seção 2, o termo Λ^{LN} se cancela na divisão com a função de partição, de modo que a analogia como o modelo clássico se faz exata no limite.

Comentários finais

Deste exemplo, fica claro como a técnica do mapeamento clássico–quântico pode ser aplicada. Também vimos a importância do teorema de Lie-Trotter durante o procedimento. Um último ponto a se destacar é na passagem

$$\sum_{\{\sigma_i^z\}} \left\langle \left\{ \sigma_i^z \right\} \left| \prod_{j=1}^L \mathcal{O} \left| \left\{ \sigma_i^z \right\} \right. \right\rangle = \sum_{\{\sigma_{i,j}^z\}} \left[\prod_{j=0}^{L-1} \langle \left\{ \sigma_{i,j+1}^z \right\} | \mathcal{O} | \left\{ \sigma_{i,j}^z \right\} \rangle \right].$$

Para obter a última igualdade, utilizamos que a identidade pode ser escrita na forma

$$\mathbb{I} = \sum_{\{\sigma_i^z\}} |\{\sigma_i^z\}\rangle \langle \{\sigma_i^z\}|.$$

No entanto, qualquer outra resolução da identidade poderia ter sido utilizada. Para o caso onde o operador \mathcal{O} dependa da posição e do momento de uma partícula, pode-se utilizar, por exemplo

$$\mathbb{I} = \int d^d \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|; \quad \mathbb{I} = \int \frac{d^d \mathbf{p}}{(2\pi)^d} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|.$$

A utilização dessas resoluções da identidade, pelo mesmo procedimento, nos leva a formulação da mecânica quântica por meio de integrais de caminho [28, 17]. Pode-se simular variáveis contínuas, com o formalismo de tempo imaginário utilizando-se das mesmas técnicas deste trabalho [15]. Além disso, em Teoria Quântica de Campos, usualmente estamos interessados em calcular valores médios da forma

$$\langle 0 | T[\hat{\phi}(x_1) \dots \hat{\phi}(x_n)] | 0 \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \dots \phi(x_n) e^{iS[\phi]}}{\int \mathcal{D}\phi e^{iS[\phi]}}.$$

Definindo-se o termo auxiliar (J, ϕ) por

$$(J, \phi) = \int d^d x J(x) \phi(x),$$

pode-se verificar que [29]

$$\frac{\delta^n}{\delta J(x_1) \dots \delta J(x_n)} \frac{\int \mathcal{D}\phi e^{iS[\phi] - i(J, \phi)}}{\int \mathcal{D}\phi e^{iS[\phi]}} \Bigg|_{J=0} = (-i)^n \langle 0 | T[\hat{\phi}(x_1) \dots \hat{\phi}(x_n)] | 0 \rangle.$$

Este procedimento é análogo à introdução da variável μ que utilizamos em (21).

Como pode ser visto, existe uma semelhança entre valores esperados sobre o estado de vácuo e funções de correlação na formulação de integrais de caminho e médias sobre ensambles em mecânica estatística. Essa analogia se verifica quando se trabalha no espaço-tempo euclidiano (tempo imaginário) [29]. Definindo a função de partição

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi] - (J, \phi)},$$

onde S_E é a ação euclidiana e (J, ϕ) é definido pela mesma forma funcional de antes, porém integrando sobre o espaço euclidiano.

Identificando

$$S_E[\phi] = \beta H[\phi],$$

com $H[\phi]$ sendo o funcional de energia do campo ϕ e β o inverso da temperatura, a analogia começa a se mostrar.

Este é um caso especial da equivalência entre teoria quântica de campos e mecânica estatística, baseada na correspondência [29]

$$\begin{array}{ccc} e^{-it\hat{H}} & \leftrightarrow & e^{-\beta\hat{H}} \\ \text{Operador de translação temporal} & & \text{Operador densidade} \end{array}.$$

A razão por trás de tal correspondência é ainda um mistério para a Física [29].

A forma prática de se utilizar a analogia é considerar uma teoria de campos em $d - 1$ dimensões espaciais à temperatura β^{-1} . No espaço euclidiano, denotamos $x = (\mathbf{x}, \tau)$. O campo independente do tempo $\psi(\mathbf{x})$ com auto-estados $|\psi\rangle$, pode ser utilizado para escrever a função de partição na forma [29]

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta\hat{H}} = \int \mathcal{D}\psi \langle \psi | e^{-\beta\hat{H}} | \psi \rangle.$$

Utilizando integrais de caminho, podemos escrever [29]

$$\langle \psi | e^{-\beta\hat{H}} | \psi \rangle = \int_{\phi(\mathbf{x}, 0) = \psi(\mathbf{x})}^{\phi(\mathbf{x}, \beta) = \psi(\mathbf{x})} \mathcal{D}\phi \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int_\Omega d^{d-1}\mathbf{x} \mathcal{H}[\phi(\mathbf{x}, \tau)] \right\},$$

onde $\mathcal{H}[\phi(\mathbf{x}, \tau)]$ é a densidade Hamiltoniana e Ω um volume em $d - 1$ dimensões. A função de partição é então dada por

$$Z = \int_{\phi(\mathbf{x}, \beta) = \phi(\mathbf{x}, 0)} \mathcal{D}\phi \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int_\Omega d^{d-1}\mathbf{x} \mathcal{H}[\phi(\mathbf{x}, \tau)] \right\}.$$

Nos limites $\Omega \rightarrow \infty$ e $\beta \rightarrow \infty$, obtém-se uma teoria de campos em d dimensões euclidianas [29].

Alguns físicos acreditam que estas ideias são muito mais profundas do que simplesmente uma técnica para tratar problemas, tendo ligação direta com as propriedades do espaço-tempo, apesar de não existir estudos experimentais que corroborem para isso [30].

5.3 Observáveis de interesse

Aplicando a técnica apresenta nesta seção, pode-se verificar as seguintes equações

$$\begin{aligned}\langle \hat{\sigma}_i^z \rangle &= \left\langle \frac{1}{N_y} \sum_{k=1}^{N_y} \sigma_{i,k} \right\rangle_{\text{cl}}, \\ \langle \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z \rangle &= \left\langle \frac{1}{N_y} \sum_{k=1}^{N_y} \sigma_{i,k} \sigma_{j,k} \right\rangle_{\text{cl}}, \\ \langle \hat{\sigma}_i^x \rangle &= \left\langle \frac{1}{N_y} \sum_{k=0}^{N_y} \sigma_{i,k} \sigma_{i,k+1} \right\rangle_{\text{cl}}, \\ \langle \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x \rangle &= \left\langle \frac{1}{N_y^2} \left(\sum_{k=0}^{N_y} \sigma_{i,k} \sigma_{i,k+1} \right) \left(\sum_{k=0}^{N_y} \sigma_{j,k} \sigma_{j,k+1} \right) \right\rangle_{\text{cl}}, \\ \langle \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^x \rangle &= \left\langle \frac{1}{N_y^2} \left(\sum_{k=0}^{N_y} \sigma_{i,k} \right) \left(\sum_{k=0}^{N_y} \sigma_{j,k} \sigma_{j,k+1} \right) \right\rangle_{\text{cl}}.\end{aligned}$$

Com estes resultados, podemos estudar correlações no modelo quântico de Ising e até uma das desigualdades de Bell por meio do método de Monte Carlo.

Um importante resultado obtido na seção 7 é o da violação de uma desigualdade de Bell na transição de fase. Com isso em mente, preparou-se a seção 6 que aborda o tema de forma simplificada.

6 Emaranhamento Quântico e Desigualdades de Bell

Emaranhamento Quântico

Sistemas quânticos apresentam comportamentos que não são observados em sistemas clássicos. Alguns exemplos são interferências entre estados e o tunelamento. Esses fenômenos podem ser observados em sistemas de uma partícula. Para um sistema composto de diversos objetos quânticos, existem algumas correlações entre os subsistemas que se diferem de possíveis correlações encontradas em sistemas clássicos. Tais correlações não clássicas parecem, a princípio, levar a paradoxos, como é o caso do famoso trabalho escrito por Einstein, Podolsky e Rosen em 1935 [31]. Sistemas que apresentam estas correlações não clássicas são ditos estarem em um *estado emaranhado*. Esta seção tem por objetivo a introdução às ideias do emaranhamento quântico e apresentar a chamada *desigualdade de Bell*. Estas ideias serão utilizadas no estudo do modelo quântico de Ising, onde se observará a violação de uma desigualdade de Bell.

Sistemas quânticos compostos são sistemas que podem ser separados em subsistemas. Isso ocorre, geralmente, quando a distância entre os subsistemas é maior do que a dimensão desses, por exemplo em uma cadeia de íons. o espaço de Hilbert associado a um sistema composto é dado pelo produto tensorial $\mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ dos espaços correspondentes de cada subsistema [32]. Para apresentar as ideias propostas, consideremos sistemas compostos por apenas dois subsistemas, descrito pelo espaço $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$.

Considere que cada subsistema tenha sido preparado no estado $|\psi_i\rangle$ ($i = 1, 2$). O estado do sistema composto é então

$$|\Psi_s\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle. \quad (24)$$

Vamos supor que se possa fazer apenas medidas locais no sistema, tendo acesso a um único subsistema por vez. Então, após a medida de um operador local $\hat{A} \otimes \mathbb{I}$, onde \hat{A} é um operador que age sobre \mathcal{H}_1 e \mathbb{I} é a identidade que age sobre \mathcal{H}_2 , o estado do primeiro subsistema será projetado sobre um auto-estado do operador \hat{A} , enquanto que o estado do segundo subsistema permanecerá inalterado. Se, em seguida, um observador realizar uma medida local no segundo subsistema, o resultado será independente da primeira medida realizada. Portanto, os resultados das medidas nos diferentes subespaços são descorrelacionados entre si; só dependem do estado do subsistema sobre o qual agem.

Estados mais gerais do espaço $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ são dados por superposições de estados do tipo (24), como

$$|\Psi_e\rangle = \frac{|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle}{\sqrt{2}},$$

onde $|\psi_i\rangle \neq |\phi_i\rangle$.

Vamos supor que realiza-se uma medida do operador $\hat{A} \otimes \mathbb{I}$, com $\hat{A} = \sum_i a_i |a_i\rangle\langle a_i|$, resultando no valor a_j . Supondo também que $\langle a_j | \phi_1 \rangle = 0$, o estado do sistema necessariamente colapsará para o estado

$$|a_j\rangle \otimes |\psi_2\rangle.$$

Nesta nova situação, o estado do segundo subsistema também foi alterado e a medida de um operador local sobre o segundo subsistema está condicionada ao resultado da medida do primeiro subsistema. Para ver isso claramente, considere o operador $\hat{B} = \sum_i b_i |b_i\rangle\langle b_i|$. Suponha que

$$|\psi_2\rangle = \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i |b_i\rangle; \quad |\phi_2\rangle = \sum_{j \in \mathcal{J}} \mu_j |b_j\rangle,$$

com a condição adicional de que

$$\mathcal{I} \cap \mathcal{J} = \emptyset; \quad \mathcal{I} \neq \emptyset, \quad \mathcal{J} \neq \emptyset.$$

Então, uma medida do operador $\mathbb{I} \otimes \hat{B}$ sobre o estado $|a_j\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ (i.e., logo após a medida de $\hat{A} \otimes \mathbb{I}$ sobre $|\Psi_e\rangle$) só pode tomar valores no conjunto $\{b_i: i \in \mathcal{I}\}$, sendo impossível se obter qualquer valor do conjunto $\{b_j: j \in \mathcal{J}\}$. Portanto, medidas locais passam a afetar o sistema como um todo. Situações interessantes surgem quando, por exemplo, os subsistemas se encontram distantes e não interagindo diretamente.

Como um caso particular de um estado da forma adotada para $|\Psi_e\rangle$, considere o seguinte estado:

$$|\Phi^+\rangle = \frac{|+1, +1\rangle + |-1, -1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (25)$$

Vamos tentar escrever $|\Phi^+\rangle$ como o produto tensorial de dois estados $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}_i = \text{span}\{|-1\rangle, |+1\rangle\}$, $i = 1, 2$. Para tal, é necessário que

$$[\alpha |-1\rangle + \beta |+1\rangle] \otimes [\gamma |-1\rangle + \epsilon |+1\rangle] = \frac{|+1, +1\rangle + |-1, -1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (26)$$

Realizando o produto tensorial, temos

$$(\alpha |-1\rangle + \beta |+1\rangle) \otimes (\gamma |-1\rangle + \epsilon |+1\rangle) = \alpha\gamma |-1, -1\rangle + \alpha\epsilon |-1, +1\rangle + \beta\gamma |+1, -1\rangle + \beta\epsilon |+1, +1\rangle.$$

Para que se faça a igualdade em (26), é necessário que

$$\alpha\epsilon = 0, \quad \beta\gamma = 0.$$

Se $\alpha\epsilon = 0$, então $\alpha = 0$ ou $\epsilon = 0$. Mas, se $\alpha = 0$, então $\alpha\gamma = 0$, logo, o termo $|-1, -1\rangle$ desaparece do produto. Da mesma forma, se $\epsilon = 0$, $\beta\epsilon = 0$ e ficamos impossibilitados de escrever o termo $|+1, +1\rangle$. Analogamente, o caso $\beta\gamma = 0$ também leva a uma inconsistência.

A conclusão é de que não existem estados $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_1$ e $|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_2$ tais que $|\Phi^+\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$. Isso ocorre porque a cardinalidade do espaço $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ é maior do que a do conjunto formado pelos produtos tensoriais de dois elementos de \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 . É simples ver que, para estados que não podem ser escritos na forma $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$, podemos encontrar operadores locais para os quais as ideias apresentadas acima para $|\Psi_e\rangle$ podem ser aplicadas. Portanto, estes estados apresentam uma correlação intrínseca, que é de origem exclusivamente quântica. Defina-se, portanto, *estados emaranhados* como sendo os estados $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$ que não podem ser escritos na forma $|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle$, para $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}_i$ [32].

Desigualdades de Bell

A Mecânica Quântica impõe uma visão da natureza diferente do que se encontra na Física Clássica. Na Teoria Quântica, o valor de um dado observável é, em geral, indeterminado até que se realize uma medida do mesmo; a Mecânica Quântica apenas nos diz os possíveis resultados de uma medida e suas probabilidades. Esta nova visão não era aceita por muitos físicos na época do desenvolvimento da teoria. Um famoso trabalho que se apresentava em oposição a essa visão é o chamado *artigo EPR* [31], mencionado no início da seção.

A trabalho de EPR propunha um experimento mental no qual os autores acreditavam demonstrar que a Mecânica Quântica é uma teoria incompleta da Natureza. O trabalho tem como base a ideia de que qualquer teoria física completa deveria conter o que foi denominado “elementos de realidade”. Uma condição suficiente para que uma dada propriedade física fosse um elemento de realidade seria a possibilidade de se prever com certeza o valor daquela propriedade imediatamente antes da realização da medida [16].

Consideremos o estado emaranhado $|\Phi^+\rangle$ apresentado acima. Vamos dizer que os estados $|\pm 1\rangle$ representam os auto-estados do operador $\hat{\sigma}^z$ com auto-valor ± 1 . Suponha que os spins estejam a uma grande distância um do outro. Se um observador medir o observável $\hat{\sigma}^z \otimes \mathbb{I}$ obtendo $+1$, ele poderá prever com certeza que a medida de $\mathbb{I} \otimes \hat{\sigma}^z$ por um observador junto ao outro spins será -1 . O argumento é similar para o caso onde o resultado da medida de $\hat{\sigma}^z \otimes \mathbb{I}$ é -1 . Devido ao fato de o primeiro observador poder prever com certeza o resultado da medida do outro observador, esta propriedade física deveria corresponder a um elemento de realidade, segundo o critério EPR [16]. No entanto, a Mecânica Quântica não nos permite dizer do resultado da medida do segundo observador a princípio, logo essa deveria ser uma teoria incompleta, como defendiam os autores do trabalho [16].

30 anos após o trabalho de EPR, foi proposto um experimento capaz de verificar se o EPR estava certo. O resultado do experimento se mostrou de acordo com a Mecânica Quântica, invalidando o trabalho de EPR. O ingrediente utilizado para essa invalidação experimental são as chamadas *desigualdades de Bell*.

As desigualdades de Bell *não* são resultados da Mecânica Quântica [16]. Por isso, o que se segue é uma discussão utilizando probabilidade clássica. A fim de evitar confusões, os valores esperados clássicos são denotados por $\mathbf{E}(\cdot)$, enquanto que os valores esperados quânticos continuam a ser denotados por $\langle \cdot \rangle$.

Começamos imaginando o seguinte experimento mental. Duas partículas são preparadas por um procedimento que possa ser reproduzido. As duas partículas são separadas e cada uma é entregue a um dos experimentais Alice e Bob. Vamos supor que Alice possa medir uma de duas propriedades físicas P_Q e P_R e Bob também possa medir uma de duas propriedades P_S e P_T . Suponha que a medida de cada propriedade resulte em um valor ± 1 e que ambos os experimentais não decidam antecipadamente qual propriedade medir.

Alice e Bob recebem as partículas ao mesmo tempo e decidem aleatoriamente qual das propriedades medir. Ambos realizam a medição *simultaneamente* (de forma que os eventos são conectados por um intervalo espaço-temporal não causal). Portanto, a medida de um observador não pode influenciar a medida do outro.

Sejam Q, R, S e T valores para as propriedades P_Q, P_R, P_S e P_T , da forma como o experimento foi designado, Q, R, S e T são variáveis aleatórias. Notando que

$$QS + RS + RT - QT = (Q + R)S + (R - Q)T,$$

e como $R, Q = \pm 1$, segue que $(Q + R)S = 0$ ou $(R - Q)T = 0$, o que nos permite ver que $QS + RS + RT - QT = \pm 2$.

Sendo $p(q, r, s, t)$ a probabilidade de que, antes da medida ser realizada, o sistema esteja em um estado onde $Q = q, R = r, S = s$ e $T = t$, o valor esperado da quantidade $QS + RS + RT - QT$ é

$$\mathbf{E}(QS + RS + RT - QT) = \sum_{q,r,s,t} (qs + rs + rt - qt)p(q, r, s, t).$$

Mas como $(qs + rs + rt - qt) \leq 2$ e $\sum_{q,r,s,t} p(q, r, s, t) = 1$, segue que

$$\mathbf{E}(QS) + \mathbf{E}(RS) + \mathbf{E}(RT) - \mathbf{E}(QT) \leq 2. \quad (27)$$

A inequação (27) faz parte do conjunto das chamadas desigualdades de Bell, uma vez que a primeira delas foi descoberta por John Bell.

Alice e Bob podem repetir os experimentos diversas vezes a fim de estudar a validade da desigualdade (27).

Agora, considere que as partículas preparadas e enviadas para Alice e Bob sejam partículas com spins descrito pelo estado $|\Phi^+\rangle$

$$|\Phi^+\rangle = \frac{|+1, +1\rangle + |-1, -1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (28)$$

Novamente, Alice e Bob recebem cada um uma das partículas quânticas. Alice e Bob realizam medidas dos observáveis

$$\begin{aligned} Q &= \hat{\sigma}_1^z, & S &= \frac{\hat{\sigma}_2^z + \hat{\sigma}_2^x}{\sqrt{2}}, \\ R &= \hat{\sigma}_1^x, & T &= \frac{-\hat{\sigma}_2^z + \hat{\sigma}_2^x}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

Sobre o estado $|\Phi^+\rangle$, podemos calcular os valores esperados de QS, RS, RT e QT e verificar que

$$\langle QS \rangle_{\Phi^+} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle RS \rangle_{\Phi^+} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle RT \rangle_{\Phi^+} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle QT \rangle_{\Phi^+} = -\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Portanto,

$$\langle QS \rangle_{\Phi^+} + \langle RS \rangle_{\Phi^+} + \langle RT \rangle_{\Phi^+} - \langle QT \rangle_{\Phi^+} = 2\sqrt{2} > 2. \quad (29)$$

$\langle QS \rangle + \langle RS \rangle + \langle RT \rangle - \langle QT \rangle$ é chamado de um *funcional de Bell*.

O resultado em (29) contradiz (27). Logo, uma verificação experimental não pode concordar com ambos. Como já mencionado, a Natureza se mostra em acordo com o resultado previsto pela Mecânica Quântica [16].

Isso significa que pelo menos uma das duas hipóteses feitas para a derivação da desigualdade de Bell está errada. As suposições feitas são:

- i) As propriedades físicas P_Q, P_R, P_S e P_T possuem valores Q, R, S e T que existem independentemente da medição (hipótese de *realismo*).
- ii) As medidas de Alice de alicé não influenciam a de Bob e vice-versa, uma vez que são realizadas simultaneamente (hipótese de *localidade* ou *causalidade*).

Ambas as hipóteses em conjunto são conhecidas como *realismo local*.

O resultado da desigualdade de Bell mostra que pelo menos uma das hipóteses acima não está correta; o mundo não é localmente realístico [16].

Para este trabalho, nosso interesse na desigualdade de Bell se apresenta no fato de podermos avaliá-la fazendo o uso do mapeamento clássico–quântico. Esse estudo nos permite estudar o emaranhamento do modelo quântico de Ising em função da temperatura. Como veremos, a desigualdade de Bell passa a ser violada na temperatura de transição de fase, para primeiros vizinhos. Para sítios mais afastados, a violação ocorre a uma temperatura mais baixa. Em ambos os casos o valor máximo de $2\sqrt{2}$ é atingido conforme o sistema se aproxima da temperatura zero.

7 Resultados

Nesta seção apresentaremos os resultados obtidos para a simulação de uma rede de 100×100 spins. Os critérios de parada foram determinados computacionalmente como um pré-processo antes da simulação, seguindo as ideias apresentadas na subseção 4.4. Os maiores valores de passos para o Monte Carlo foram de 2500, com 300 passos para o Metropolis. 1000 passos foram utilizados para os estados transientes.

Os resultados apresentados são tais que a constante de acoplamento, J , foi adotada igual a 1 e a temperatura é definida em unidades para qual a constante de Boltzmann se iguala a 1; a temperatura de transição de fase para o modelo isotrópico é portanto

$$T_c = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \simeq 2,27,$$

nessas unidades.

A rede anisotrópica foi estudada com mesmo tamanho e com a definição de unidades tais que

$$k = 1; \quad J_x = 1; \quad J_y = \gamma J_x,$$

seguindo as ideias da seção 5. Adotou-se $\gamma = 0,1$ para as simulações.

7.1 Observáveis Clássicos para o Modelo Isotrópico

O modelo isotrópico pode ser utilizado de forma comparativa, uma vez que se conhece a solução exata desse. Isso é importante para algumas discussões, como efeitos de rede finita, e a identificação de uma temperatura de transição, antes da adaptação para a rede anisotrópica. Além disso, argumentaremos posteriormente porque os resultados da rede isotrópica podem ser extrapolados para o caso anisotrópico.

Um primeiro observável de interesse é a energia do sistema. A Figura 2 apresenta os resultados obtidos para a energia média por spin.

Quando a temperatura se aproxima de zero, qualquer excitação na rede a deixam “mais quente” do que o ambiente⁷ de tal modo que flutuações tendem a levar a rede para o estado de mais baixa energia. Isso se torna claro retornando à discussão sobre a energia de Helmholtz (subseção 2.3). Com isso, a energia por spins esperada é

$$\frac{E}{N} = -\frac{J}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i \sigma_j = 1) = -2J = -2.$$

⁷No sentido de tender a doar energia para o exterior.

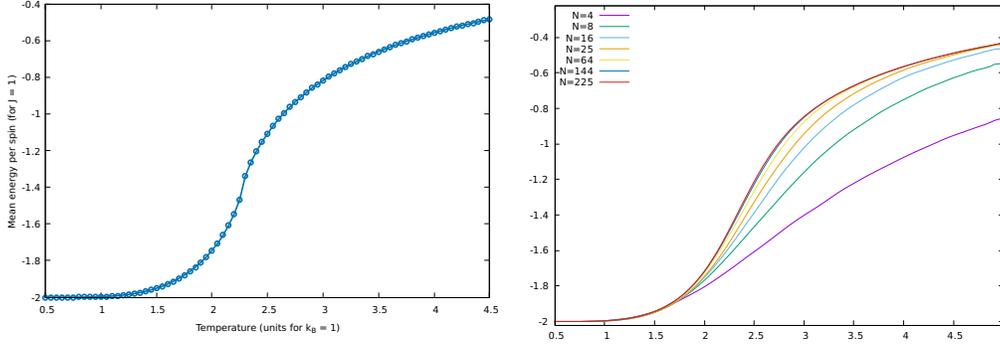


Figura 2: Energia média por spin, $\langle E/N \rangle$, em função da temperatura para uma rede de 100×100 spins (figura da esquerda) e variando-se o tamanho da rede $N \times N$, para N de 4 até 225 (figura à direita). As unidades de temperatura foram adotadas tais que o termo de troca J é a unidade de energia e a constante de Boltzmann k a unidade de entropia.

Da Figura 2 vemos que o limite de baixas temperaturas se verifica. Além disso, para temperaturas altas, o termo de entropia é dominante, de tal modo que as variáveis de spins tendem a variáveis aleatórias independentes, logo

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \sim \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \sim 0 \Rightarrow \langle E/N \rangle \sim 0.$$

Os resultados da simulação parecem se aproximar deste limite, porém, à primeira vista, parece incerto fazer tal afirmação. Outra dúvida plausível diz respeito à transição de fase esperada para $T = 2,27$.

As questões levantadas acima podem ser respondidas com um procedimento chamado *finite size scaling*, que consiste em estudar o comportamento de um observável em função do tamanho da rede [15, 24]. Tal estudo revela uma divergência logarítmica da derivada da energia média por spin e uma aproximação lenta do valor zero da energia por spin para temperatura altas [14], explicando os resultados obtidos.

Uma outra forma de se verificar o comportamento esperado é buscar um observável cuja convergência nos casos limites e na transição sejam mais rápidos. Esse procedimento pode ser feito com um *finite size scaling* para tamanhos pequenos de rede, o que poupa tempo da busca em comparação com um procedimento guloso. Dois dos observáveis de maior interesse e de rápida convergência são a magnetização resultante, M e a susceptibilidade magnética χ , definidos como

$$M = \left\langle \sum_i \hat{\sigma}_i^z \right\rangle; \quad \chi = \frac{\partial M}{\partial B}.$$

A Figura 3 apresenta a magnetização resultante por spin, juntamente com a solução exata, e a susceptibilidade magnética por spin em função da temperatura.

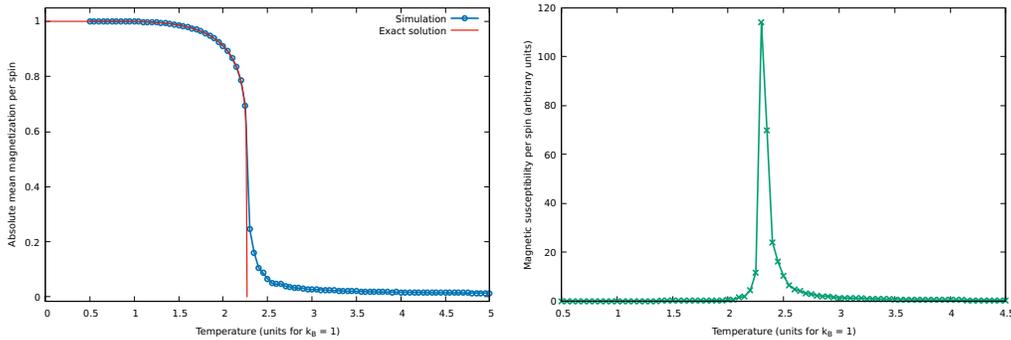


Figura 3: Figura da esquerda: magnetização absoluta resultante por spin em função da temperatura. Em azul, resultados obtidos por meio da simulação; em vermelho, solução exata. Figura da direita: susceptibilidade magnética por spin em função da temperatura. As unidades de temperatura foram adotadas tais que o termo de troca J é a unidade de energia e a constante de Boltzmann k a unidade de entropia.

Os resultados encontrados para a magnetização estão em acordo com a solução de Onsager [11, 10]. Nota-se que um pouco acima da temperatura de transição há um pequeno desvio da solução exata; isso se deve a um efeito chamado de

desaceleração da convergência na região de criticalidade, além dos efeitos de rede finita. A susceptibilidade magnética também revela a transição de fase e sua natureza de segunda ordem [6, 24].

7.2 Observáveis Quânticos - Modelo Clássico Anisotrópico

Nesta última subseção, chegamos ao objetivo final do trabalho. Antes de apresentar qualquer resultado, discutiremos o porquê de o modelo anisotrópico poder ser extrapolado do modelo isotrópico.

A dualidade de Kramers-Wannier nos diz que o modelo anisotrópico apresenta uma transição de fase para uma temperatura T_c tal que [4, 8, 9]

$$\sinh(2J/kT_c) \sinh(2\gamma J/kT_c) = 1.$$

Disso, pode-se obter o diagrama de fases da Figura 4 [4], que nos diz que, para cada valor de γ positivo, existe uma temperatura crítica.

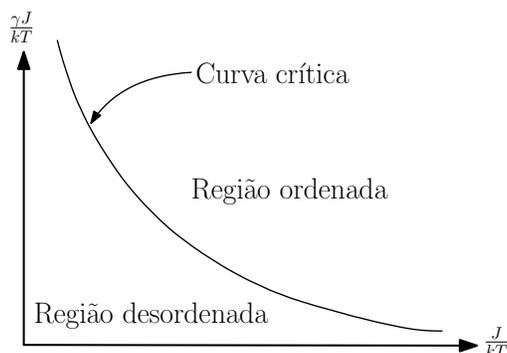


Figura 4: Diagrama de fases para o modelo de Ising isotrópico clássico.

O diagrama de fases da Figura 4 nos diz que o efeito da anisotropia é de deslocar a região de transição de fase. Sendo assim, espera-se que os resultados para o modelo anisotrópico sejam equivalentes aos do modelo isotrópico com a temperatura de transição deslocada, a menos de pequenas mudanças em alguns valores, como por exemplo, da energia no limite de baixas temperaturas.

Com as ideias anteriores, espera-se uma transição a uma temperatura mais baixa quando $\gamma < 1$, condição necessária para o mapeamento do modelo quântico no modelo clássico (limite $L \rightarrow \infty$ ou $\delta\tau \rightarrow 0$; vide [4]). A exemplo, a Figura 5 apresenta os resultados da magnetização por spin para simulações com $\gamma = 0, 1$.

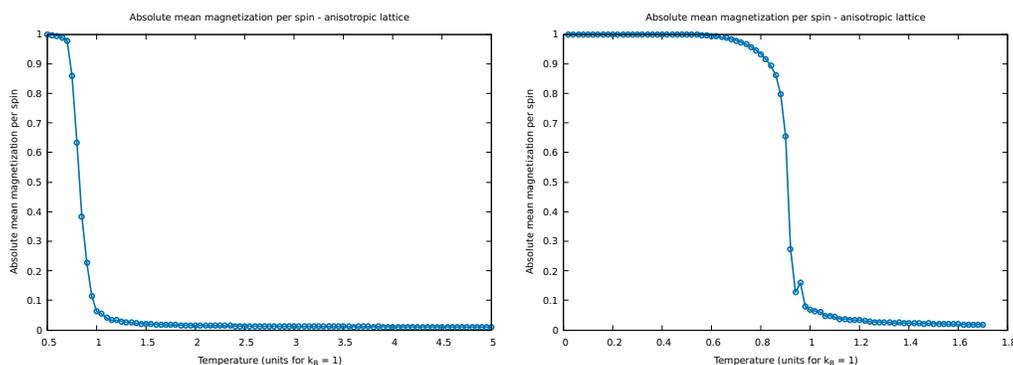


Figura 5: Magnetização resultante média por spin em função da temperatura para a rede isotrópica com $J_\tau = \gamma J$ e $\gamma = 0, 1$. Na figura da esquerda, o intervalo de temperatura é $[0, 5; 5, 0]$; na figura da direita é $[0, 1; 1, 7]$. Nota-se que o efeito da anisotropia é apenas de deslocar a região de transição, como esperado pela dualidade de Kramers-Wannier.

Na Figura 5 pode-se notar um leve desvio do comportamento da magnetização na região de criticalidade não observada na Figura 3. Isso não é uma simples coincidência; quando a temperatura de transição é mais baixa, a adaptação do intervalo de temperaturas para $[0, 5; 5, 0]$ leva a erros numéricos maiores no cálculo de $e^{-\Delta E/T}$. Para lidar com tal

problema, é necessário considerar mais repetições do procedimento do Monte Carlo com o Metropolis e no estágio de termalização, sendo então mais custoso. Além disso, um valor de γ maior do que 1 é um caso análogo para quando $\gamma < 1$, tanto pela dualidade do modelo quanto pelo fato de se mapear a direção vertical na horizontal. Sendo assim, escolheu-se trabalhar com o modelo isotrópico, de onde pode-se tirar as conclusões qualitativas corretas.

Para estudar o modelo quântico, utilizamos os observáveis da subseção 5.3. Com esses, podemos estudar o valor esperado da medida de spins em uma dada direção, por exemplo por, $\langle \hat{\sigma}_i^\alpha \rangle$, as correlações $\langle \hat{\sigma}_i^\alpha \hat{\sigma}_j^\alpha \rangle - \langle \hat{\sigma}_i^\alpha \rangle \langle \hat{\sigma}_j^\alpha \rangle$, para $\alpha = x, y, z$ e, em especial, o funcional de Bell em (29) do final da seção 6.

Abaixo da temperatura de transição de fase, espera-se um alinhamento dos spins. Sendo assim, $\langle \hat{\sigma}_i^z \rangle = \pm 1$, a depender da direção de alinhamento dos spins⁸. Para temperaturas suficientemente altas, os spins têm probabilidade igual de se encontrarem em qualquer estado, logo, $\langle \hat{\sigma}_i^z \rangle = 0$, nesse limite. A Figura 6 mostra o comportamento descrito acima.

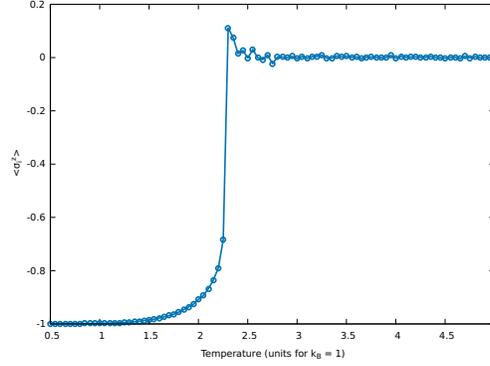


Figura 6: Valor esperado $\langle \hat{\sigma}_i^z \rangle$ em função da temperatura, para a rede isotrópica.

Como o alinhamento dos spins na direção z é independente da posição, $\langle \hat{\sigma}_i^z \rangle = \langle \hat{\sigma}_j^z \rangle$. Uma vez que uma excitação acima do estado fundamental é muito instável para baixas temperaturas, espera-se que os spins estejam todos alinhados. Sendo assim, espera-se que $\langle \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z \rangle = 1$. Portanto, a correlação $C(\hat{\sigma}_i^z, \hat{\sigma}_{i+1}^z) = \langle \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z \rangle - \langle \hat{\sigma}_i^z \rangle \langle \hat{\sigma}_{i+1}^z \rangle$ deve se anular. Um gráfico de $C(\hat{\sigma}_i^z, \hat{\sigma}_{i+1}^z)$ é apresentado na Figura 7

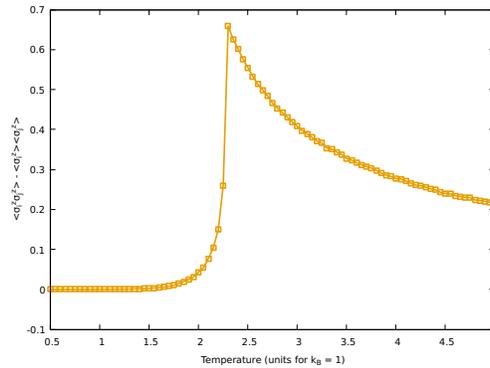


Figura 7: Correlação $C(\hat{\sigma}_i^z, \hat{\sigma}_{i+1}^z) = \langle \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z \rangle - \langle \hat{\sigma}_i^z \rangle \langle \hat{\sigma}_{i+1}^z \rangle$ em função da temperatura.

Da figura acima, pode-se observar uma aumento na correlação na transição de fase. Esse aumento aparece em outros tipos de correlações como $\hat{\sigma}^x \hat{\sigma}^x$, apresentada na Figura 8.

Com estes observáveis, podemos avaliar a desigualdade de Bell para primeiros vizinhos. Como as correlações apresentam um aumento na transição de fase, a hipótese de que alguma desigualdade de Bell seja violada na transição é razoável. Tal violação implicaria que a rede se encontra em um estado emaranhado. Na Figura 9, apresentamos o

⁸Esta direção é dada pelo campo magnético aplicado para quebrar a simetria do estado fundamental do modelo e fazer os spins escolherem uma direção. Ao final, o campo é desligado e é feita a termalização.

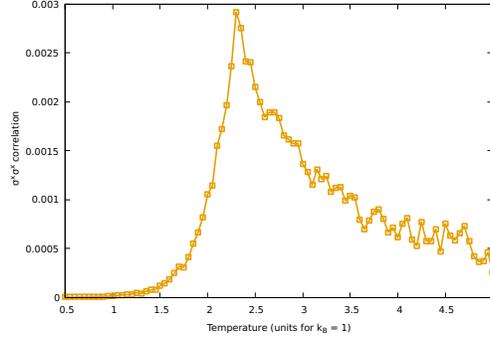


Figura 8: Correlação $C(\hat{\sigma}_i^x, \hat{\sigma}_{i+1}^x) = \langle \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x \rangle - \langle \hat{\sigma}_i^x \rangle \langle \hat{\sigma}_{i+1}^x \rangle$ em função da temperatura.

gráfico do funcional de Bell da equação (29). Nota-se que a desigualdade de Bell é violada na região de transição de fase. Além disso, a desigualdade é violada para toda temperatura abaixo da temperatura crítica e tende para o valor $2\sqrt{2}$, que é esperado quando os primeiros vizinhos estão emaranhados no estado

$$|\Phi^+\rangle = \frac{|+1, +1\rangle + |-1, -1\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Este resultado é esperado quando lembramos que o estado fundamental do modelo de Ising é composto por todos os spins alinhados em uma direção.

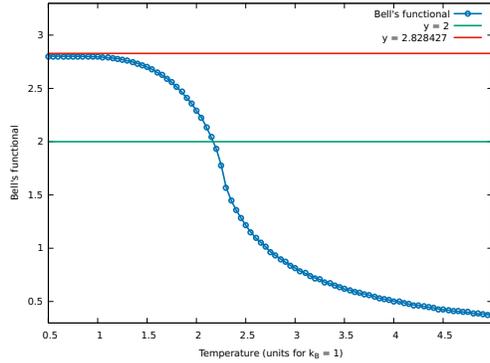


Figura 9: Funcional de Bell em função da temperatura. A figura mostra uma violação da desigualdade de Bell na temperatura de transição de fase. O valor limite $2\sqrt{2}$ é atingido para baixas temperaturas.

Correlações de longo alcance

Durante a transição de fase, é esperado que a rede desenvolva correlações de longo alcance [4]. Para verificar isso, podemos avaliar os mesmos observáveis estudado para primeiros vizinhos, nas figuras acima, e verificar se o comportamento está em acordo com o esperado. Para as correlações $C(\hat{\sigma}_i^\alpha, \hat{\sigma}_j^\alpha)$, pode-se observar o comportamento esperado para quando os sítios i e j estão afastados; qualitativamente semelhante ao observado para primeiros vizinhos, na transição de fase e abaixo dessa. A Figura 10 apresenta as correlações $\sigma^z \sigma^z$ e $\sigma^x \sigma^x$ para spins afastados.

O resultado mais importante continua sendo a desigualdade de Bell, que também é violada para spins afastados e tende ao seu valor de saturação no limite de baixas temperaturas, conforme a Figura 11.

A saturação da desigualdade nos diz que os spins tendem a se encontrar no estado $|\Phi^+\rangle \sim |+1, +1\rangle + |-1, -1\rangle$, quando a temperatura é suficientemente baixa, para quaisquer dois spins da rede. Das propriedades do estado $|\Phi^+\rangle$ discutidas na seção 6, vemos que os spins tendem a se alinharem abaixo da temperatura crítica. Esse alinhamento está relacionado ao surgimento de ilhas de spins [4] e também é o motivo da presença de uma magnetização resultante não nula abaixo da transição.

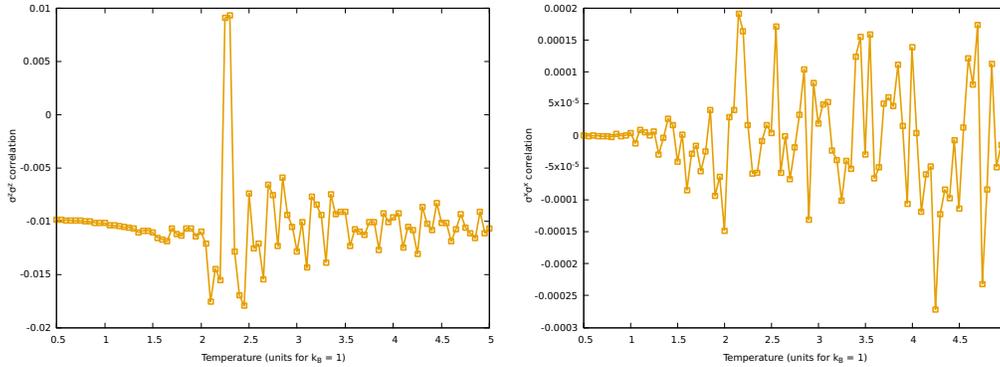


Figura 10: Correlações $\sigma^z \sigma^z$ (gráfico à esquerda) e $\sigma^x \sigma^x$ (gráfico à direita) para spins afastados na cadeia.

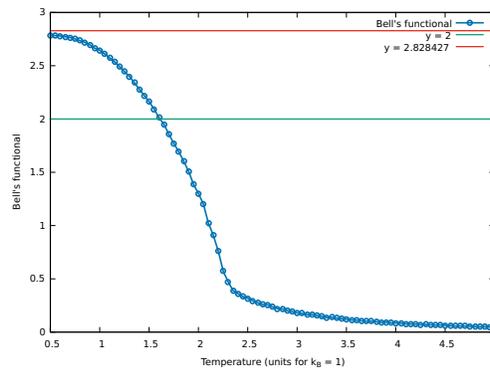


Figura 11: Funcional de Bell em função da temperatura para spins afastados. Nota-se uma violação da desigualdade de Bell um pouco abaixo da temperatura de transição. O valor limite $2\sqrt{2}$ é atingido para baixas temperaturas.

8 Conclusão

No decorrer do trabalho, as ideias e a técnica do mapeamento clássico–quântico foram desenvolvidas. Por meio dessas, pôde-se estudar o Modelo de Ising Quântico unidimensional, partindo do modelo clássico bidimensional, de forma numérica. Além disso, a técnica do mapeamento nos permite fazer estudos analíticos e obter resultados partindo de um modelo cuja solução exata é conhecida. Essas ideias deram origem ao estudo de sistemas integráveis, bem como o desenvolvimento de técnicas de simulação, como dinâmica molecular via integrais de caminho [15].

Com o mapeamento de certos observáveis quânticos, foi possível identificar um aumento nas correlações durante a transição de fase, em especial, para primeiros vizinhos da rede. Abaixo da transição de fase, verifica-se que uma desigualdade de Bell passa a ser violada, revelando um estado emaranhado do sistema. Além disso, observou-se a violação da desigualdade e sua saturação para sítios mais afastados, verificando o surgimento de correlações de longo alcance. Tais correlações, tendem a alinhar os spins, justificando o surgimento de uma magnetização resultante não nula abaixo da temperatura de transição.

Ao final da seção dedicada ao mapeamento clássico–quântico, discutiu-se um pouco da relação entre teoria de campos e mecânica estatística, através desta técnica. Isso mostra uma grande riqueza que emergiu desse estudo. A exemplo, na teoria de Ginsburg-Landau, a função de partição é

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta H[\phi]},$$

para um campo $\phi(x)$ em um volume d dimensional. A energia livre $\beta H[\phi]$ pode ser expandida em potências dos chamados *parâmetros de ordem*, os quais estão relacionados a transições de fase. Os pontos críticos e diferentes fases da teoria de Ginsburg-Landau se refletem na teoria de campos associada através do processo de renormalização [29], mostrando quão profundo e relevante é a correspondência entre as duas teorias e a técnica do mapeamento clássico–quântico no estudo e entendimento de temas contemporâneos da Física.

Agradecimentos

Existem diversas pessoas que ajudaram de forma direta e indireta para a concretização deste trabalho e da minha graduação como um todo. Apesar de cada pessoa ser singular em nossa história, citar a todos demandaria muitas páginas e, eventualmente, alguns poderiam ser esquecidos. Por isso, escolhi citar apenas alguns nomes ou grupos de pessoas que ajudaram em minha caminhada.

Agradeço, primeiramente, a todos os meus familiares que me ajudaram durante a graduação. Sem o apoio, a paciência, o amor e a ajuda desses, não teria sequer a possibilidade de me tornar um físico.

Grande espaço das minhas memórias está reservada para meus amigos de dentro e de fora da UFABC. Seja pelas conversas estimulantes, pela ajuda ou pelo afeto e companheirismo que nos ajudam a prosseguir, agradeço a todos pelas boas lembranças.

Este trabalho não seria possível sem a companhia do meu orientador Eduardo Novais, que sempre esteve disposto a me ouvir e providenciar boas palavras e me apresentou aos assuntos estudados.

Tenho grande sentimento pela UFABC, por todos os professores com os quais tive contato e pessoas que me ajudaram a construir cada pedaço do meu presente. Também pela Unifesp, pois sem o tempo que passei lá e as pessoas que conheci, tenho absoluta certeza de que não seria quem sou hoje.

Agradeço ao professor Alex Dias, que me orientou na escrita deste último trabalho e pelo grande exemplo e inspiração que é.

Finalmente, reservo um especial agradecimento ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa de iniciação científica que me levou a este trabalho.

Apêndices

A Origem da interação de troca

Uma primeira tentativa natural para entender o magnetismo em alguns materiais seria a interação entre dipólos magnéticos. Para dois dipólos μ_1 e μ_2 separados pelo vetor \mathbf{r}_{12} , a energia de interação é [33]

$$\frac{\mu_1 \cdot \mu_2 - 3(\mu_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})(\mu_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_{12})}{|\mathbf{r}_{12}|^3}.$$

No entanto, o valor máximo desta energia é igual a kT para a temperatura de 1 K [33]. Portanto, para fenômenos magnéticos para temperaturas mais altas, a interação dipolar é desprezível.

O ordenamento magnético entre spins ocorre devido ao esforço dos elétrons para minimizar a repulsão coulombiana entre si, quando se considera a estatística de Fermi-Dirac [33]. A interação de troca é, na verdade, um modo conveniente de se considerar o resultado final da repulsão de Coulomb.

O surgimento da interação de troca é facilmente entendido através do modelo de Heitler-London [34]. Consideremos a molécula de H_2 . A Hamiltoniana completa do sistema é

$$\hat{H}_{\text{H}_2} = \left\{ \left[\frac{\hat{\mathbf{P}}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1|} + \frac{\hat{\mathbf{P}}_2^2}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2|} \right] + \left[\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_1|} \right] \right\} \otimes \mathbb{I}_{\text{spin}}. \quad (30)$$

$\hat{\mathbf{P}}_i$ é o operador de momento do elétron i , m é a massa do elétron e e é a carga fundamental em módulo. \mathbf{r}_i denota a posição do elétron i enquanto que \mathbf{R}_j a do núcleo j . Note que a Hamiltoniana acima considera a aproximação de Born-Öppenheimer (adotada pelo resto do apêndice).

O termo interno ao primeiro chaves é simplesmente a soma de duas Hamiltonianas do átomo de Hidrogênio. No segundo chaves, estão concentrados os termos de interação entre os elétrons, entre os núcleos e entre os elétrons de um átomo com o núcleo de outro átomo. No cálculo devido a Heitler e London, o segundo chaves é tratado como uma perturbação para dois átomos de Hidrogênio não interagentes. A princípio, assume-se que a interação entre os spins é negligenciada, portanto o termo \mathbb{I}_{spin} .

Para o átomo de Hidrogênio, negligenciando o spin, a solução do problema de auto-valor $\hat{H} |E\rangle = E |E\rangle$ é

$$\hat{H}_{\text{spatial}} |n, l, m\rangle = E_n |n, l, m\rangle; \quad E_n = \frac{-13,6}{n^2} \text{ eV}, \quad (31)$$

Cont.

onde

$$\hat{H}_{\text{spatial}} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_1|}$$

e (n, l, m) são os números quânticos que determinam o estado quântico (orbital) do elétron.

Para a soma de duas Hamiltonianas do átomo de Hidrogênio, a solução geral será dada pelo espaço gerado pela base

$$\{|n, l, m\rangle \otimes |n', l', m'\rangle\}.$$

Como a Hamiltoniana total do átomo de Hidrogênio é $\hat{H}_{\text{spatial}} \otimes \mathbb{I}_{\text{spin}}$, podemos tomar os auto-estados de spin como os auto-estados de $\hat{\mathbf{S}}^2$ e \hat{S}_z ; $|s, s_z\rangle$.

Como elétrons são férmions, sua estatística impõe que o estado quântico total de muitos elétrons deve ser anti-simétrico; em especial,

$$|\psi_{1,2}\rangle = |\text{spatial}_{1,2}\rangle \otimes |\text{spin}_{1,2}\rangle; \quad |\psi_{1,2}\rangle = -|\psi_{2,1}\rangle.$$

No que se segue, utilizamos a convenção de que a primeira posição de um estado quântico se refere ao elétron rotulado como 1 enquanto que a segunda posição se refere ao outro elétron. Assim, $|A, B\rangle$ nos diz que o elétron 1 está no estado A e o elétron 2 no estado B . Nossa convenção pode ser entendida pela seguinte equação:

$$\phi_A(\mathbf{r}_1)\phi_B(\mathbf{r}_2) = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | A, B \rangle = \langle \mathbf{r}_1 | A \rangle \langle \mathbf{r}_2 | B \rangle.$$

Como os estados de spins foram escolhidos auto-estados de $\hat{\mathbf{S}}^2 = (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2)^2$ e $\hat{S}_z = \hat{S}_{z,1} + \hat{S}_{z,2}$, pela teoria de adição de momento angular, temos que

$$|\text{spin}_{1,2}\rangle = \begin{cases} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, & S = 0, S_z = 0; \\ |\uparrow\uparrow\rangle, & S = 1, S_z = 1; \\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, & S = 1, S_z = 0; \\ |\downarrow\downarrow\rangle, & S = 1, S_z = -1. \end{cases} \quad (32)$$

O estado com spin total S igual a 0 é chamado singleto enquanto que os estados de spins total 1 são chamados de tripleto. Pela anti-simetria da função de onda total, o resultado acima nos diz que

$$|\text{spatial}_{1,2}\rangle = \begin{cases} \frac{|AB\rangle + |BA\rangle}{\sqrt{2+2S^2}}, & \text{se } |\text{spin}_{1,2}\rangle \text{ for anti-simétrico;} \\ \frac{|AB\rangle - |BA\rangle}{\sqrt{2-2S^2}}, & \text{se } |\text{spin}_{1,2}\rangle \text{ for simétrico;} \end{cases} \quad S = |\langle A | B \rangle|. \quad (33)$$

Este resultado está relacionado com o fato da ligação química ser covalente, uma vez que os átomos são idênticos.

Com o desenvolvimento feito, conseguimos descrever a Hamiltoniana \hat{H}_{H_2} a menos do termo entre chaves, o qual trataremos como uma perturbação sobre o resultado encontrado. Denotando por \hat{H}' o termo de perturbação dado por

$$\hat{H}' = \hat{V} \otimes \mathbb{I}_{\text{spin}}; \quad \hat{V} = \left[\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{e^2}{|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_2|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_1|} \right] \quad (34)$$

temos que as correções de primeira ordem são dada por

$$E_s^{(1)} = \langle \text{singleto} | \hat{H}' | \text{singleto} \rangle \quad \text{e} \quad E_t^{(1)} = \langle \text{tripleto} | \hat{H}' | \text{tripleto} \rangle,$$

onde diferenciamos os estados quânticos dos elétrons por *singleto* e *tripleto* uma vez que 1) $E_s^{(1)}$ e $E_t^{(1)}$ independem do estado de spins e 2) fixado o estado de spins no estado de singleto ou em algum dos tripletos, a parte espacial do estado quântico é unicamente determinada.

Um cálculo direto mostra que

$$E_s^{(1)} = \frac{\langle AB | \hat{V} | AB \rangle + \langle AB | \hat{V} | BA \rangle}{1 + S^2};$$

$$E_t^{(1)} = \frac{\langle AB | \hat{V} | AB \rangle - \langle AB | \hat{V} | BA \rangle}{1 - S^2}.$$

A diferença de energia para a primeira correção é

$$E_t^{(1)} - E_s^{(1)} = \frac{2S^2 \langle AB | \hat{V} | AB \rangle - 2 \langle AB | \hat{V} | BA \rangle}{1 - S^4} =: -J.$$

Heitler e London verificaram que $J < 0$ para o caso do átomo de Hélio [34], logo o estado de singleto tem menor energia e os spins tendem a se alinhar em direções opostas, levando a um sistema anti-ferromagnético. Quando $J > 0$, a energia dos estados de tripleto é menor, o que leva a um alinhamento ferromagnético pela simetria do estado de spin.

O termo $\langle AB|\hat{V}|BA\rangle$ em $E_{s,t}^{(1)}$ é conhecido como termo de troca⁹, de onde segue o nome interação de troca. Fica claro que a interação de troca emerge do potencial de Coulomb e da estatística dos elétrons. Portanto, é razoável nos perguntarmos porque a interação entre os spins é dito surgir da interação de troca. Este é o resultado de um trabalho feito por Dirac e Heisenberg em 1926, que mostrou que o termo de perturbação \hat{V} em (34) pode ser trocado por uma Hamiltoniana agindo sobre os graus de liberdade de spins [18, 19].

Uma vez que a diferença de energia entre os estados pode ser associada a configuração dos spins, é razoável poder escrever a ação de \hat{V} como uma Hamiltoniana agindo sobre os graus de liberdade de spin. Além disso, como a energia depende apenas se o estado é um singleto ou um dos tripletos, também podemos levantar a hipótese de que a Hamiltoniana seja independente de S_z . Notando que a energia é invariante quando ambos os spins eletrônicos rodam pela mesma quantidade [33], vamos upor que

$$\hat{H}_{\text{spins}} = -J\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = -\frac{J}{2} [\hat{\mathbf{S}}^2 - \hat{\mathbf{S}}_1^2 - \hat{\mathbf{S}}_2^2].$$

É direto verificar que

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{spins}} |\text{singleto}\rangle &= \frac{J}{4} |\text{singleto}\rangle; \\ \hat{H}_{\text{spins}} |\text{tripleto}\rangle &= -\frac{J}{4} |\text{tripleto}\rangle.\end{aligned}$$

Portanto, a menos de uma constante, o termo de perturbação \hat{V} pode ser trocado pela Hamiltoniana \hat{H}_{spins} .

A forma de interação acima levou ao desenvolvimento do chamado *modelo de Heisenberg*, o qual assume que para uma coleção de ions metálicos em uma rede, a energia de interação entre os spins é dada por

$$\hat{H}_{\text{Heisenberg}} = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j.$$

O mecanismo de troca de Heisenberg, como também é conhecido, dá origem a interações de curto alcance entre spins. O modelo de Ising surge em materiais quando se há um alinhamento a um eixo cristalino particular, como ocorre na excitações magnéticas mais baixas do isolante LiHoF₄, por exemplo [21]. Uma segunda realização mais fiel do modelo de Ising foi obtida em um experimento com um cristal de CoNb₂O₆. Para esse caso, o spin do tipo Ising reside no íon Co⁺⁺, alinhado paralelamente ou anti-paralelamente a um eixo cristalino, por meio do acoplamento spin-órbita. Neste último material, as interações são essencialmente entre primeiros vizinhos e surgem por meio do mecanismo de troca de Heisenberg, com a escala de energia sendo determinada pela interação de Coulomb. À temperatura $T = 0$, as interações entre os spins do íon Co⁺⁺ os fazem alinhar em uma mesma direção. A aplicação de um campo magnético à direção transversa ao eixo de alinhamento induz um tunelamento entre os dois estados de orientação para cada spin. Em tal situação, este spins é descrito pela Hamiltoniana do modelo quântico de Ising [21].

Referências

- [1] E. Ising. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31:253–258, 1925.
- [2] Somendra M. Bhattacharjee and Avinash Khare. Fifty years of the exact solution of the two-dimensional ising model by onseger. February 2008.
- [3] Barry A. Cipra. An introduction to the ising model. *The American Mathematical Monthly*, 1987.
- [4] John B. Kogut. An introduction to lattice gauge theory and spin systems. *Rev. Mod. Phys.*, 51:659–713, Oct 1979.
- [5] Huang and Kerson. *Statistical Mechanics*. John Wiley and Sons, 1987.
- [6] R. J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. London: Academic Press, 1982.
- [7] R Peierls and M. Born. On ising’s model of ferromagnetism. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 32, 10 1936.

⁹O nome segue da ideia de que $\langle AB|\hat{V}|BA\rangle$ mede o quanto a perturbação \hat{V} influencia os elétrons a “trocarem seus orbitais”.

- [8] G. Kramers, H.; Wannier. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. part i. *Physical Review (Series I)*, 60, 1941.
- [9] G. H. Kramers, H. A.; Wannier. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. part ii. *Physical Review (Series I)*, 60, 8 1941.
- [10] Lars Onsager. Crystal statistics i a two-dimensional model with and order-disorder transition. *Physical Review*, 65, February 1944.
- [11] C. N. Yang. The spontaneous magnetization of a two-dimensional ising model. *Physical Revier (Series I)*, 85, March 1952.
- [12] Barry M. McCoy and Jean-Marie Maillard. The importance of the ising model. *Progress of Theoretical Physics*, 127(5):791, 2012.
- [13] Eduardo Fradkin and Leonard Susskind. Order and disorder in gauge systems and magnets. *Phys. Rev. D*, 17:2637–2658, May 1978.
- [14] Jacques Kotze. Introduction to monte carlo methods for an ising model of a ferromagnet. *arXiv:0803.0217 [cond-mat.stat-mech]*, Mar 2008.
- [15] Michel LeBellac, Fabrice Mortessagne, and G. George Batrouni. *Equilibrium and non-equilibrium statistical thermodynamics*. Cambridge University Press, 2004.
- [16] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge, 2000.
- [17] R. Shankar. *Principles of quantum mechanics*. Plenum, 1994.
- [18] Heisenberg, W. Z. Physik (1926) 38: 411. <https://doi.org/10.1007/BF01397160>. Mehrkörperproblem und resonanz in der quantenmechanik. *Springer-Verlag*.
- [19] P. A. M. Dirac . On the theory of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 112:661–677, Oct 1926.
- [20] Gastão A. Braga and Francisco Fontenele Araujo Jr. O limite termodinâmico e independência das condições de contorno para o modelo de ising d-dimensional. 1999.
- [21] Subir Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2007.
- [22] Herbert B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley & Sons, 1958.
- [23] Mehran Kardar. *Statistical Physics of Particles*. Cambridge University Press, 2007.
- [24] R. K. Pathria and Paul D. Beale. *Statistical Mechanics*. Elsevier, 1998.
- [25] Sheldon Ross. *A First Course in Probability*. Pearson, 2010.
- [26] Petersen, Karl E. *Ergodic Theory and Harmonic Analysis*. Cambridge University Press, 1995.
- [27] Brian C. Hall. *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations*. Springer, 2015.
- [28] R. P. Feynman and A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, 1965.
- [29] Huang K. *Quantum Field Theory: From Operators to Path Integrals*. Wiley, 2ed. edition, 2010.
- [30] A. M. Polyakov. *Gauge Fields and Strings*. Contemporary concepts in physics. Taylor & Francis, 1987.
- [31] A Einstein, B Podolsky, and N Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical Review*. 47 (10): 777–780. *Bibcode:1935PhRv..47..777E. doi:10.1103/PhysRev.47.777*, 1935.
- [32] A. Uhlmann, B. Crell (auth.), Andreas Buchleitner, Carlos Viviescas, Markus Tiersch (eds.). *Entanglement and Decoherence: Foundations and Modern Trends*. Lecture Notes in Physics 768. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 edition, 2009.
- [33] M.P. Marder. *Condensed Matter Physics*. Wiley, 2010.
- [34] W. Heitler; F. London. Wechselwirkung neutraler atome und homöopolare bindung nach der quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 44, 1927.