



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

PONTOS EXCEPCIONAIS EM TRANSIÇÃO DE FASE QUÂNTICA

MARIONIR MACEDO CASTELO BRANCO NETO

Orientador: Giancarlo Queiroz Pellegrino
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

BELO HORIZONTE
FEVEREIRO DE 2019

MARIONIR MACEDO CASTELO BRANCO NETO

PONTOS EXCEPCIONAIS EM TRANSIÇÃO DE FASE QUÂNTICA

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática e Computacional.

Área de concentração: Modelagem Matemática e Computacional

Linha de pesquisa: Métodos Matemáticos Aplicados

Orientador: Giancarlo Queiroz Pellegrino
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL
BELO HORIZONTE
FEVEREIRO DE 2019

B816p Branco Neto, Marionir Macedo Castelo
Pontos excepcionais em transição de fase quântica / Marionir
Macedo Castelo Branco Neto. – 2019.
39 f.

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação
em Modelagem Matemática e Computacional.
Orientador: Giancarlo Queiroz Pellegrino.
Dissertação (mestrado) – Centro Federal de Educação Tecnológica
de Minas Gerais.

1. Operadores hamiltonianos – Teses. 2. Teoria quântica – Teses.
3. Estatística quântica – Teses. I. Pellegrino, Giancarlo Queiroz.
II. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. III. Título.

CDD 530.12



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
COORDENAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

“PONTOS EXCEPCIONAIS EM TRANSIÇÃO DE FASE QUÂNTICA”

Dissertação de Mestrado apresentada por **Marionir Macêdo Castelo Branco Neto**, em 25 de fevereiro de 2019, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional do CEFET-MG, e aprovada pela banca examinadora constituída pelos professores:

Prof. Dr. Giancarlo Queiroz Pellegrino
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Prof. Dr. Renato Moreira Angelo
Universidade Federal do Paraná

Prof. Dr. Antônio Paulo Baêta Scarpelli
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Prof. Dr. Éden Santana Campos Amorim
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Visto e permitida a impressão,

Prof. Dr. Thiago de Souza Rodrigues
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em
Modelagem Matemática e Computacional

Resumo

Nos estudos da mecânica quântica, a energia total do sistema quântico é representada pelo operador hamiltoniano $H(\lambda)$, em que λ é eventualmente um parâmetro do sistema. Na teoria, espera-se que esse operador seja hermitiano, porém essa exigência pode ser relaxada permitindo-se que o parâmetro assuma valores complexos, com parte imaginária diferente de zero. Com esse novo conceito de um hamiltoniano não hermitiano, é sustentado que no comportamento dos autovalores relacionados a esse operador pode ser observada a transição de fase quântica. Esta é a mudança do comportamento do sistema quando determinado valor crítico do parâmetro é atingido. Essa transição – quântica – ocorre em temperatura nula, por definição. Para o estudo da transição de fase quântica, foi introduzido o conceito de ponto excepcional, como sendo o valor de uma variável independente λ de uma matriz $H(\lambda)$ em que há alteração na quantidade de seus autovalores. O intuito desse trabalho é determinar como é o comportamento da ocorrência desses pontos excepcionais, quando a matriz hamiltoniana tem seu parâmetro variado no plano complexo, utilizando como laboratório um dos modelos Curie-Weiss, o modelo Lipkin – originário da física nuclear. Dentro desse modelo, foram feitos estudos da matriz para diferentes valores de momento angular, operador que determina a construção da hamiltoniana, e foram encontradas distribuições dos pontos excepcionais no plano complexo. Observa-se que essas distribuições dependem do valor do momento angular e que o número de pontos excepcionais cresce com o momento angular. Além disso, os pontos excepcionais tendem a se acumular próximos ao valor crítico (real) que determina a transição de fase quântica. A partir desse comportamento, um subconjunto dos pontos excepcionais permitiu ajuste de curva que tende a revelar o valor crítico para a ocorrência da transição de fase quântica. Sugere-se, por fim, que a mesma abordagem possa ser implementada para outros modelos Curie-Weiss vindos de diferentes áreas: modelo de emparelhamento – também da física nuclear; modelo Jaynes-Cummings – da ótica quântica; modelo bicamada – da física da matéria condensada; e modelo Heisenberg – do magnetismo.

Palavras-chave: Pontos excepcionais. Transição de fase quântica. Operadores não hermitianos.

Abstract

For quantum mechanics, the total energy of the quantum system is represented by the Hamiltonian operator $H(\lambda)$, where λ is possibly a parameter of the system. In theory, we expect that this operator is Hermitian, but this requirement can be relaxed by allowing the parameter to assume complex values, with an imaginary part different from zero. With this new concept of a non-Hermitian Hamiltonian, it is maintained that, in the behavior of the eigenvalues associated with this operator, one can observe the quantum phase transition. This is a change in the behavior of the system when certain critical value of the parameter is reached. This transition - quantum - occurs at zero temperature, by definition. For the study of the quantum phase transition, the concept of an exceptional point was introduced as the value of an independent variable λ of a matrix $H(\lambda)$ where there is a change in the quantity of its eigenvalues. The purpose of this work is to determine the behavior of the occurrence of these exceptional points, when the Hamiltonian matrix has its parameter varied in the complex plane, using as laboratory one of the Curie-Weiss models, the Lipkin model - originating in nuclear physics. Within this model, matrix studies were performed for different values of angular momentum, which determines the Hamiltonian's construction, and distributions of the exceptional points in the complex plane were found. It is observed that these distributions depend on the value of the angular momentum and that the number of exceptional points grows with the angular momentum. In addition, the exceptional points tend to accumulate near the critical (real) value that determines the quantum phase transition. From this behavior, a subset of the exceptional points allowed curve fitting that tends to reveal the critical value for the occurrence of the quantum phase transition. It is suggested, finally, that the same approach can be implemented for other Curie-Weiss models coming from different areas: pairing model - also from nuclear physics; Jaynes-Cummings model - from quantum optics; bilayer model - from condensed matter physics; and Heisenberg model - from magnetism.

Keywords: Exceptional points. Quantum phase transition. Non-Hermitian operators.

Lista de Figuras

| | |
|---|----|
| Figura 1 – Representação de diagrama de fase no plano $\lambda \times T$ | 6 |
| Figura 2 – Representação de níveis de baixa energia de $H(\lambda)$ | 7 |
| Figura 3 – Gráfico Polinômio característico P x Autovalor $E(\lambda)$. À medida que λ muda de valor, a função torna-se diferente e as raízes mudam de posição. Em vermelho aparece a curva para $\lambda = 9$, em laranja para $\lambda = 8$, em verde para $\lambda = 7$ | 12 |
| Figura 4 – Esquema referente a um exemplo de transição dos pares de férmions segundo o modelo emparelhamento. As setas para cima são os férmions e as setas azuladas indicam a transição. | 19 |
| Figura 5 – Esquema representando um sistema estudado pelo modelo bicamada. Os éxcitons (excitons, em inglês) são representados como a atração das partículas representados pelos círculos preenchidos e não preenchidos para diferenciar as camadas de gás bidimensional (two-dimensional hole gas). Fonte: (BERMAN et al., 2010) | 21 |
| Figura 6 – Gráfico de Momento angular x Número de pontos excepcionais (N_{PE}) para o modelo Lipkin | 29 |
| Figura 7 – Autovalores determinados em plano \mathbb{C} para o modelo Lipkin com diferentes valores do parâmetro λ : (a) $\lambda = -1 - 2i$; (b) $\lambda = -2i$ (Ponto Excepcional) ; (c) $\lambda = 1 - 2i$ | 30 |
| Figura 8 – Perspectiva que demonstra os pontos excepcionais no plano \mathbb{C} para modelo Lipkin | 31 |
| Figura 9 – Pontos excepcionais com menor parte imaginária para cada j | 32 |
| Figura 10 – Ajuste dos pontos excepcionais com valores da parte imaginária menores para cada momento angular. J varia de 3 a 10. | 32 |

Sumário

| | |
|--|-----------|
| 1 – Introdução | 1 |
| 2 – Fundamentação Teórica | 4 |
| 2.1 Transição de Fase Quântica | 4 |
| 2.2 Os Pontos Excepcionais | 6 |
| 2.3 O Hamiltoniano não hermitiano | 11 |
| 2.4 Os Modelos Curie-Weiss | 14 |
| 2.4.1 As Transformações Holstein-Primakoff | 14 |
| 2.4.2 A álgebra SU(2) | 14 |
| 2.4.3 As transformações Holstein-Primakoff | 15 |
| 2.4.4 O modelo Lipkin | 17 |
| 2.4.5 O modelo Emparelhamento | 18 |
| 2.4.6 O modelo Bicamada | 20 |
| 2.4.7 O modelo Jaynes-Cummings com N átomos | 21 |
| 2.4.8 O modelo Heisenberg | 24 |
| 3 – Resultados | 26 |
| 3.1 Os Pontos Excepcionais do Modelo Lipkin | 26 |
| 3.2 Ajustes de Pontos | 29 |
| 4 – Conclusão | 33 |
| Referências | 35 |
| | |
| ANEXO A – Determinação iterativa do polinômio característico para o modelo Lipkin | 37 |
| A.1 A Matriz Tridiagonal Intercalada | 37 |
| A.1.1 O Determinante da matriz tridiagonal intercaldada | 37 |

Capítulo 1

Introdução

A mecânica quântica é uma área do conhecimento relativamente nova quando comparada com outras das ciências exatas e mostrou-se, desde o momento de sua origem até a atualidade, como uma excelente teoria que propicia resultados satisfatórios tanto na descrição quanto na predição de vários fenômenos, muito importante em situações de extraordinário isolamento, de forma a manter coerências. De forma recente toda a teoria é colocada em questionamento, assim como todos os aspectos e detalhes dos seus princípios; no entanto, ela mostra-se sempre bem fundamentada (COHEN-TANNOUDJI; DIU; LALOË, 1986). Nesta teoria, os sistemas quânticos são caracterizados por suas propriedades, de modo que um conjunto suficiente de valores dessas propriedades define um estado quântico do sistema.

A mudança, em alguns casos abrupta, do comportamento coletivo dos constituintes de um sistema quântico é uma noção intuitiva útil para caracterizar uma Transição de Fase. Tradicionalmente, a ideia é de que o fenômeno da transição de fase se dá como um processo contínuo e que durante a mudança de estados há a coexistência de duas fases. Nada obstante, para alguns sistemas quânticos há modelos matemáticos que sustentam outro tipo de comportamento, pois as transformações onde não há coexistência de fases podem ser chamadas também de Transição de Fase. Normalmente o comportamento dos constituintes dos sistemas é descrito como uma dependência de um parâmetro característico do sistema estudado; o valor desse parâmetro, quando há a transição, é chamado de valor crítico (VOJTA, 2003). No caso da transição de fase quântica (TFQ), a dependência de um parâmetro e a identificação de seu valor crítico podem ser abordadas a partir do estudo do espectro de autovalores de um operador linear, como é apresentado no presente texto.

O operador **Hamiltoniano** H é o observável que representa a **energia total** E do sistema quântico. Podemos retirar das mais básicas definições da mecânica quântica a sua relação com o valor de E .

$$H\Psi = E\Psi \quad (1)$$

Entendendo a equação acima, temos o operador H atuando em uma autofunção Ψ , com E sendo seu autovalor (valor numérico da energia). (GRIFFITHS; SCHROETER, 2018).

Sendo $n \in \mathbb{N}$, o índice de autovalores que um determinado H possui, E_n é o nível de energia n . A dependência de H com um parâmetro λ leva à consideração de que, por exemplo, E_n é uma função do parâmetro e λ_c o seu valor crítico. Como será abordado em capítulo posterior, transição de fase quântica é definida quando $\frac{dE_1(\lambda_c)}{d\lambda}$ apresenta uma singularidade, sendo E_1 o estado fundamental (HEISS, 2000). A singularidade é caracterizada quando a derivada primeira $\frac{dE_1}{d\lambda}$, em casos de transição de fase de primeira ordem, enfrentam uma descontinuidade. A noção de ordem para pontos excepcionais será explicada na sua seção do capítulo de fundamentação teórica.

Na década de 30 do século passado, foram determinados os primeiros princípios da mecânica quântica e esses se mostram bem fundamentados desde então. Entre eles há a teoria em que é sustentada por definir os tais observáveis como matrizes hermitianas, aquelas que são autoadjuntas, ou seja, iguais a sua transposta conjugada complexa. Porém, é benéfico para a literatura e estudo de sistemas quânticos a consideração de operadores não hermitianos (BENDER, 2007). Não é com objetivo de formular novas teorias que se estuda os hamiltonianos dessa forma, mas sim com objetivo de analisar como o conceito é fundamental tendo em vista os resultados apresentados nos trabalhos que tomam essas considerações. (JONES-SMITH, 2010).

Procura-se descrever, neste trabalho, um conjunto de diferentes sistemas quânticos usando uma forma padrão para o operador H :

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda H_{int}. \quad (2)$$

Na equação 2, H_0 e H_{int} descrevem respectivamente a energia dos constituintes como se não interagissem e a energia associada à interação entre eles, e λ é um escalar que interage com a matriz hermitiana H_{int} regulando a importância relativa de cada termo para o operador H . Facilmente é permitido obter H não-hermitiano apenas admitindo-se $\lambda \in \mathbb{C}$, complexo (ŠINDELKA; SANTOS; MOISEYEV, 2017). A importância acadêmica para tal consideração é incorporar mais sistemas que utilizam hamiltonianos, dentro dos conjuntos de representações em matrizes não hermitianas, que podem ser analisados, e eventualmente ter problemas resolvidos, com a perspectiva de uma mecânica quântica não hermitiana (BENDER; BOETTCHER, 1998).

Nesse contexto, ponto excepcional (PE) é um termo interessante para os estudos de TFQ, que foi introduzido pela primeira vez na literatura em 1966 por (KATO, 2013), em seu trabalho *Perturbation Theory of Linear Operators*. A definição mais formal é: considerando uma matriz dependente $T(x)$ de dimensão $N \times N$, o valor de x para que a quantidade de

autovalores de T se altere é chamado de ponto excepcional (KATO, 2013). Como no caso de estudo do presente trabalho se diz respeito ao operador hamiltoniano, os PE apontam os valores do parâmetro λ em que dois níveis energéticos, $E_n(\lambda)$ e $E_m(\lambda)$, autovalores, coincidem. É importante também definir esse conceito matemático não apenas analisando a quantidade de autovalores, mas também afirmando que, quando o parâmetro assume o valor de um ponto excepcional, um dos autovetores deixa de existir; tal fenômeno tem sido chamado de coalescência (HEISS; MÜLLER; ROTTER, 1998).

Nesta dissertação é sugerida a possibilidade de se usar a noção de pontos excepcionais para abordar o estudo de transição de fase quântica em um conjunto de diferentes sistemas quânticos pertencentes a uma classe conhecida como modelos Curie-Weiss. Assim, seria possível considerar sistemas de áreas do conhecimento distintas, como Lipkin, emparelhamento, Heisenberg, bi-camada e Jaynes-Cummings. Para se ter uma caracterização sucinta dessa diversidade, os modelos de Lipkin (LIPKIN; MESHKOV; GLICK, 1965) e de emparelhamento (KRIEGER; GOEKE, 1974) nasceram na física nuclear e buscam descrever o comportamento de um conjunto de partículas de dois níveis. O modelo de Heisenberg (FISHER, 1969) descreve as interações (anti-)ferromagnéticas entre spins. O modelo de Jaynes-Cummings (JAYNES; CUMMINGS, 1963) tem origem na ótica quântica e descreve a interação de átomos com um campo eletromagnético. Por fim, o modelo bi-camada (EISENSTEIN, 2003) descreve o acoplamento de elétrons em duas camadas paralelas.

Os próximos capítulos desse trabalho serão divididos da seguinte forma. Primeiramente, serão considerados alguns conceitos teóricos, para que possam ser apresentados os hamiltonianos na sua forma padrão conforme equação 2 e em termos de operadores momento angular, que tornarão possível a implementação computacional para os modelos antes descritos. Lá também será mais detalhada a física dos pontos excepcionais e transição de fase quântica, pois são os conceitos motivadores do trabalho. No capítulo dos resultados, haverá a apresentação da análise referente aos pontos excepcionais encontrados no modelo Lipkin, quando foi implementado computacionalmente o respectivo hamiltoniano. Na conclusão, último capítulo, encontram-se as considerações sobre os resultados e também o que se acredita que possa ser acrescentado para enriquecer o acervo da literatura perante o assunto.

Capítulo 2

Fundamentação Teórica

Neste capítulo, será apresentada a teoria que alicerça todo o resultado do trabalho. A transição de fase quântica é o fenômeno físico que se deseja estudar a partir da perspectiva dos pontos excepcionais; então, essas duas concepções serão expostas com o rigor matemático necessário. Do ponto de vista da mecânica quântica, o hamiltoniano é a principal ferramenta que será utilizada para entender o problema proposto. Como será explicado com mais detalhe, o hamiltoniano é necessariamente não hermitiano para que ocorram pontos excepcionais. Portanto, uma seção deste capítulo é dedicada a desenvolver a ideia de hamiltoniano não hermitiano, dando sentido à física do que for apresentado.

Os modelos Curie-Weiss são os instrumentos que oferecem o hamiltoniano para que seja possível trabalhar a ideia de transição de fase quântica em várias áreas da física. A especificação de cada um dos modelos já introduzidos é encontrada neste capítulo, assim como seus respectivos modelos matemáticos, fundamentalmente importantes para a construção do hamiltoniano. É necessário também expor um método, chamado de Transformações de Holstein-Primakoff, com o objetivo de escrever os hamiltonianos, que antes são descritos com operadores criação e aniquilação, em função de operadores de momento angular, que tornam possível o método de cálculo dos pontos excepcionais.

2.1 Transição de Fase Quântica

O conceito básico sobre transição de fase vem desde a ideia clássica. Para a abordagem que será discutida futuramente, é preciso fundamentar o comportamento crítico. Na termodinâmica, por exemplo, a transição de fase de sólido para líquido ocorre com a coexistência das duas fases, durante a transformação em uma temperatura constante para substância pura. Como definição mais fundamental, a transição de fase é a mudança básica de estado, quando um parâmetro do sistema dependente atinge um valor crítico. O novo estado, que é atingido quando o ponto crítico é ultrapassado, é extremamente diferente do estado anterior e é caracterizado por diferentes tipos de ordenação dos constituintes do sistema

em estudo.

Em casos de temperatura não nula, a transição de fase é classificada como clássica. Logo, a transição de fase quântica (TFQ) é caracterizada como todo fenômeno dessa definição que ocorre em temperatura nula ($T = 0K$). Então, um parâmetro impossível de se variar para se estudar a transição de fase quântica seria a temperatura, uma vez que, por definição, deve permanecer no mesmo valor. No lugar dela, por sua vez, varia-se outro parâmetro λ de que o hamiltoniano é dependente, $H(\lambda)$.

A escolha do parâmetro λ a ser utilizado para análise da transição de fase quântica pode não ser óbvia. Por exemplo, a magnetização total é um parâmetro óbvio de escolha para se estudar transições para ferromagnetos. Para outros casos, a escolha do parâmetro pode ser um desafio tão complicado quanto o estudo do fenômeno em si (VOJTA, 2003).

Um diagrama de fase relacionando esquematicamente a temperatura T e o parâmetro λ , como mostrado na figura 1, ilustra as noções apresentadas de transição de fase quântica e também do valor crítico λ_c . Na figura 1, por exemplo, é determinado um caminho vermelho quando o processo é de temperatura nula e passa por TFQ quando encontra λ_c . As linhas azuis delimitam uma região de incerteza de determinação de um valor único de parâmetro para a transição de fase. À medida que a temperatura se aproxima de zero, o intervalo de valores de λ em que ocorre a transição de fase se torna menor. A tendência $T \rightarrow 0$ implica $\lambda = \lambda_c$, assim como $\lambda \rightarrow \lambda_c$ implica $T = 0$ (VOJTA, 2003).

Da perspectiva de uma caracterização matemática e com vistas ao cálculo numérico das quantidades de interesse, é conveniente definir-se a transição de fase quântica tendo por base o comportamento do nível de energia do estado fundamental com respeito à variação do parâmetro λ . Para essa intenção, a figura 2 é bem ilustrativa. Esse gráfico é apenas qualitativo, ilustrando apenas uma certa propriedade.

Considera-se que o estado fundamental de energia dado por $H(\lambda)$ é uma função analítica e suave. Quando os níveis dos estados excitado e fundamental se encontram em um valor crítico, agora representado por λ_c , nesse ponto o estado fundamental não é mais analítico como função de λ e define a transição de fase quântica.

Tanto a definição no começo dessa seção como a figura 2 apresentam TFQ como ponto de singularidade da derivada primeira do nível fundamental de energia do sistema, enquanto dependente do parâmetro. É realmente útil visualizar a função estado fundamental e sua derivada em relação ao parâmetro para acrescentar a ideia de TFQ de primeira ordem, segunda ordem e assim por diante. Para o caso que $\frac{dE(\lambda)}{d\lambda}$ sofre uma descontinuidade em algum ponto de λ tem-se a TFQ de primeira ordem como acontece na figura 2, assim como para $\frac{d^2E(\lambda)}{d\lambda^2}$ sofrendo uma descontinuidade, tem-se uma TFQ de segunda ordem, por

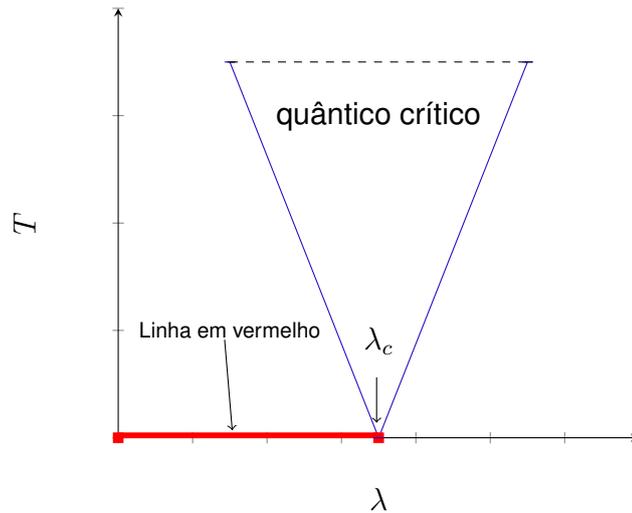


Figura 1 – Representação de diagrama de fase no plano $\lambda \times T$.

exemplo.

Um dos objetivos do trabalho apresentado é tratar TFQ em simulação computacional e sabendo dessa propriedade do estado fundamental, pois em um sistema finito de elementos, é possível visualizar quando as duas curvas suaves dos estados fundamentais se cruzam em um valor λ_c .

A expressão onde é escrito o hamiltoniano como $H = H_0 + \lambda H_{int}$ é um dos objetivos desse trabalho, tanto é que foi preocupação encontrar tal similaridade em todos os modelos a serem descritos. Esses operadores podem ser diagonalizáveis (SACHDEV, 2011).

Já é possível se ter em mente que a transição de fase quântica é descrita através de funções de onda. Como veremos na próxima seção, esta maneira de se expressar os hamiltonianos de diferentes modelos mostra-se também adaptada e conveniente para admitir a caracterização da TFQ por meio da busca e análise dos pontos excepcionais desses hamiltonianos.

2.2 Os Pontos Excepcionais

O conceito de Pontos Excepcionais foi primeiramente introduzido por (KATO, 2013) e é referente a operadores lineares e seus autovalores. Considere que $T(\lambda)$ é um operador linear tal que $T : \Omega \subset \mathbb{C}^n \rightarrow \Gamma \subset \mathbb{C}^n$ e $\lambda \in \mathbb{C}$ é tomado como parâmetro. A expressão na equação 3 exprime dois termos no lado direito, nomeados de operador não perturbado (T_o) e operador perturbação (T_{int}). No presente trabalho, o operador Hamiltoniano (H) é

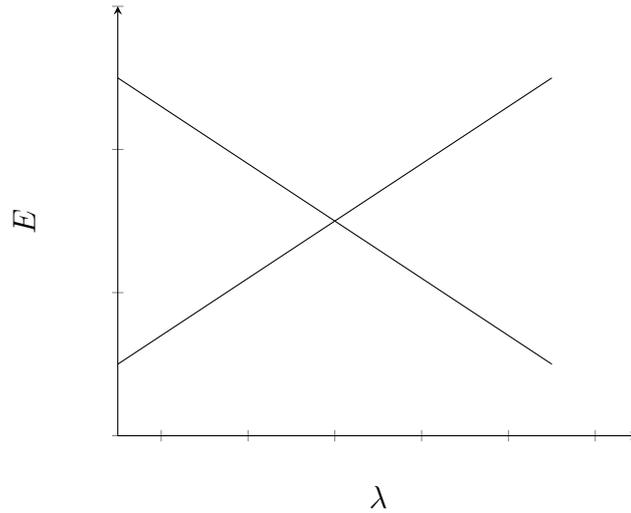


Figura 2 – Representação de níveis de baixa energia de $H(\lambda)$

expresso de maneira semelhante.

$$T = T(\lambda) = T_o + \lambda T_{int}. \quad (3)$$

Claramente, com auxílio da equação 3, o operador T tem sua operação desenvolvida principalmente por T_o ou T_{int} , dependendo do valor de λ . Essa já é uma ideia introdutória à transição de fase. Defina-se ζ como uma matriz de ordem igual à de T , com $E(\lambda)$ uma autofunção dos autovalores de T :

$$\zeta = E(\lambda)\mathbb{I}. \quad (4)$$

Seja $\dim T = s$ e enunciado que s é o grau da expressão algébrica do polinômio característico em $E(\lambda)$ dada pela expressão seguinte:

$$P = \det(T(\lambda) - \zeta). \quad (5)$$

A equação 5 é a equação que exprime o polinômio característico de T . Sendo s a quantidade de autovalores possíveis, levando-se em conta o grau da equação, com n a quantidade de autovalores distintos, é possível definir pontos excepcionais.

Pontos excepcionais são todos os valores de λ que implicam $s > n$. Um exemplo clássico seria a determinação do ponto excepcional para a matriz abaixo.

$$T(\lambda) = \begin{bmatrix} 1 & \lambda \\ \lambda & -1 \end{bmatrix} \quad (6)$$

O polinômio característico é tomado e a relação entre autovalor e parâmetro é conseguida

$$P = (1 - E(\lambda))(1 + E(\lambda)) + \lambda^2 \quad (7)$$

Para $P = 0$, uma expressão é conseguida. Há a garantia de haver raízes em funções polinomiais, mas só há apenas quantidade finita de valores de λ que respeitam a definição de pontos excepcionais. Para $n = 2$.

$$E(\lambda)_1 = (1 + \lambda^2)^{\frac{1}{2}} \quad (8)$$

$$E(\lambda)_2 = -(1 + \lambda^2)^{\frac{1}{2}} \quad (9)$$

Os únicos valores em que $E(\lambda)_+ = E(\lambda)_- = 0$ são determinados apenas quando $\lambda = i$ ou $\lambda = -i$. Esses são, portanto, os pontos excepcionais. Para esclarecer a definição, quando os valores de λ forem pontos excepcionais, o operador $T(\lambda)$ deixa de ser diagonalizável. Esse novo conceito se chama coalescência. (HEISS, 2004)

Voltando ao exemplo do operador da equação 6, pode-se procurar a expressão do autovetor $\vec{V} = (a, b)$. Sendo

$$\left[T - E(\lambda)I \right] \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (10)$$

segue que

$$\vec{V} = \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{-1 \pm \sqrt{\lambda^2 + 1}}{\lambda} \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Colocando os valores encontrados de pontos excepcionais, verifica-se que quando $\lambda = \pm i$ (pontos excepcionais), \vec{V}_A e \vec{V}_B são,

$$\vec{V}_A = \begin{bmatrix} 1 \\ +i \end{bmatrix} \quad \vec{V}_B = \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \quad (12)$$

Ou seja, quando λ é ponto excepcional, no caso $E(\lambda) = 0$, o operador T só possui um autovetor e é impossível formar-se uma base de autovetores.

Diz-se que quando dois níveis de energia **coalescem** em um determinado valor de λ esse é denominado de ponto excepcional. Mas é importante frisar a diferença entre coalescência e **degenerescência** quando se estuda pontos excepcionais. Basicamente, a degenerescência ocorre quando dois ou mais autovalores assumem o mesmo valor e cada um deles manifesta um autovetor. Ou seja, mesmo com a ocorrência do fenômeno, o operador continua sendo diagonalizável, pois não muda a quantidade de autovetores gerados para a base. Normalmente, mas não sempre, a degenerescência ocorre com operadores hermitianos. A coalescência se manifesta quando a quantidade de autovetores associados é menor que a quantidade de autovalores que assumem o mesmo valor. Por exemplo mais simples, quando dois níveis de energia assumem o mesmo valor a coalescência devolve um autovetor apenas para os dois, o que torna o operador não diagonalizável. Nos estudos de hamiltonianos não hermitianos, caracteriza se esse fenômeno ([HEISS, 2012](#)).

Portanto, defina-se aqui que um ponto excepcional é o valor do parâmetro em que se dá a coalescência de autovalores e seus autovetores correspondentes. Mesmo que a teoria da mecânica quântica peça que os operadores sejam hermitianos, os pontos excepcionais são um fenômeno encontrado apenas na física não hermitiana. Isso torna o conceito mais interessante, pois ele pode acrescentar novas maneiras de se estudar os operadores ([DEMANGE; GRAEFE, 2011](#)).

É proposta aqui uma nova maneira de se definir os pontos excepcionais em função da coalescência que deve ser respeitada. Na álgebra linear, chama-se **multiplicidade geométrica** associada a um autovalor E à dimensão do autossobespaço associado. **Multiplicidade algébrica** de um autovalor E , por sua vez, é o número de vezes que esse valor é raiz do polinômio característico. Um teorema dessa definição é que a multiplicidade geométrica de um autovalor é sempre menor ou igual a sua multiplicidade algébrica. Pode-se determinar que um operador é diagonalizável ou não de acordo com esses conceitos. Quando a multiplicidade geométrica for menor que a multiplicidade algébrica para um mesmo autovalor, o operador em questão não é diagonalizável ([BOLDRINI et al., 1980](#)). Pode-se relacionar então a coalescência de níveis de energia (autovalores em sistemas quânticos) com as multiplicidade algébrica e geométrica desses níveis; portanto, quando um nível de energia de multiplicidade algébrica maior que 1 (junção de dois níveis) tiver alterada sua multiplicidade geométrica (garante a **coalescência ao invés da degenerescência**), o valor do parâmetro que possibilita isso é chamado de ponto excepcional.

Do ponto de vista numérico, o cálculo dos pontos excepcionais pode ser feito pela resolução do sistema de equação polinomiais

$$\begin{cases} P = 0, \\ \frac{dP}{dE} = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Quando se iguala o polinômio característico a zero, como visto nos parágrafos anteriores, tem-se a relação que expressa os autovalores E como função do parâmetro λ . Além dessa relação, a anulação simultânea da derivada $\frac{dP}{dE}$ mostra os valores de λ em que o número de autovalores se altera, os pontos excepcionais, portanto (HEISS; MÜLLER; ROTTER, 1998).

O sistema da equação 13 leva em conta apenas o cálculo dos pontos excepcionais de primeira ordem, ou seja aqueles valores de λ em que acarreta dois níveis de energia coalescer em um valor apenas. Porém, é possível estudar a coalescência de três ou mais níveis se houver multiplicidades suficientes disponíveis. Pontos excepcionais de N -ésima ordem demandam que N níveis coalesçam. Os sistemas matemáticos, para esses casos, devem ser diferentes. As derivadas de ordem $N - 1$, $\frac{d^{N-1}P}{dE^{N-1}} = 0$ devem também entrar em consideração, generalizando assim o sistema das equações 13 para a equação 14.

$$\left\{ \begin{array}{l} P = 0 \\ \frac{dP}{dE} = 0 \\ \frac{d^2P}{dE^2} = 0 \\ \vdots \\ \frac{d^{N-1}P}{dE^{N-1}} = 0 \end{array} \right. \quad (14)$$

Neste trabalho, o estudo está focado em pontos excepcionais de primeira ordem apenas e, assim, a equação 13 é o instrumento para calcular os pontos. Para elucidar mais essa expressão, toma-se o exemplo já dado um pouco antes nessa seção. Um hamiltoniano dado pela mesma forma matricial da equação 6.

$$H(\lambda) = \begin{bmatrix} 1 & \lambda \\ \lambda & -1 \end{bmatrix} \quad (15)$$

O polinômio característico desse operador é dado na equação 7 e assim, com ela, é possível determinar a derivada primeira (pontos excepcionais de primeira ordem),

$$\frac{dP}{dE} = -2E(\lambda). \quad (16)$$

A equação 13 pede que a expressão da equação 16 seja igual a zero e que seja verdade junto com a equação 9, ou seja,

$$\left\{ \begin{array}{l} E(\lambda)_{\pm} = \pm(1 + \lambda^2)^{\frac{1}{2}} \\ -2E(\lambda) = 0 \end{array} \right. . \quad (17)$$

É fácil resolver o sistema 17. Há coalescência no nível $E = 0$ quando $\lambda = \pm i$. Pode-se afirmar que o fenômeno é coalescência e não degenerescência, pois quando λ assume a solução, o hamiltoniano em questão é não hermitiano e não diagonalizável.

Para ficar um pouco mais claro de forma visual, foi escolhida a equação

$$P = E(\lambda)^2 - 6E(\lambda) + \lambda, \quad (18)$$

apenas para fácil visualização, pois trabalhar com equação de segundo grau é mais didático. Espera-se que haja duas soluções reais, no máximo, sempre quando se lida com equações quadráticas. A figura 3 mostra a linha marcando $P = P(E) = 0$ (eixo x), pois as raízes dessa função são classificadas como autovalores. Ao se atribuir $\lambda = 7$ e $\lambda = 8$, encontra-se duas raízes reais, ou seja, a curva intercepta o eixo x em dois pontos distintos. A derivada da função 18 é a entregue como,

$$\frac{dP}{dE(\lambda)} = 2E(\lambda) - 6 \quad (19)$$

Nesse caso, independentemente do valor de λ , a equação $\frac{dP}{dE(\lambda)} = 0$ tem como solução apenas $E(\lambda) = 3$. Ou seja, para esse exemplo ter solução para o sistema 13, λ deve ser tal que faça com que esse valor seja raiz da função. Logo, a única maneira que isso aconteça é quando $\lambda = 9$.

Verificando a figura 3, é possível ver que as raízes são dois níveis distintos na reta \mathbb{R} quando λ assume qualquer valor a não ser 9. Quanto mais perto de 9 os níveis estão mais próximos e ficam até que em $\lambda = 9$ eles se degeneram/coalesçam. O sistema 13 então entrega essa ideia de junção de autovalores a um valor apenas, nos casos de pontos excepcionais de primeira ordem, objetivo central desse trabalho. A ideia de coalescência e degenerescência, como já foi dito, não entrou na atenção desse exemplo pois isso depende da natureza do operador. Na próxima seção, será explicado com mais detalhes o surgimento da física do hamiltoniano não hermitiano.

2.3 O Hamiltoniano não hermitiano

A teoria da mecânica quântica contém o conceito do operador hamiltoniano H como aquele que especifica os níveis de energia do sistema quântico como seus autovalores. Para garantir que o espectro de energia seja real, a teoria pede que o hamiltoniano seja hermitiano. Em termos matriciais o operador que é **hermitiano** tem sua transposta conjugada igual a sua própria matriz.

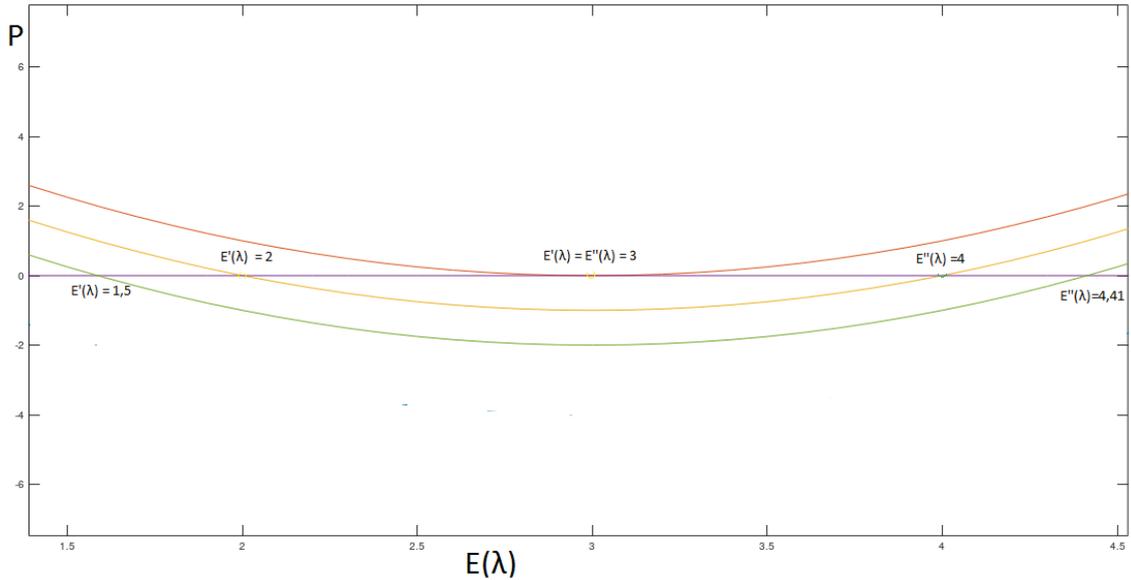


Figura 3 – Gráfico Polinômio característico P x Autovalor $E(\lambda)$. À medida que λ muda de valor, a função torna-se diferente e as raízes mudam de posição. Em vermelho aparece a curva para $\lambda = 9$, em laranja para $\lambda = 8$, em verde para $\lambda = 7$.

Essa simetria matemática imposta possibilita que o hamiltoniano devolva autovalores reais e isso torna-se bem conveniente para lidar com operador de evolução temporal, $e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$ sendo unitário. Os hamiltonianos não hermitianos violam a noção de unitariedade. Esse operador é utilizado de maneira mais tradicional para descrever a probabilidade de se encontrar uma partícula que apresenta decaimento radioativo com a evolução do tempo (MOSTAFAZADEH, 2002).

Os operadores P e T abaixo, P é paridade e T é inversão temporal, que comutam entre si, são importantes para o estudo desse tópico, pois eles ajudam a substituir a noção de hermiticidade por sua analogia. Sendo \hat{x} e \hat{p} os operadores coordenada e momento linear respectivamente, seguem as operações definidoras dos novos operadores.

$$P\hat{x}P = -\hat{x} ; P\hat{p}P = -\hat{p} \quad (20)$$

$$T\hat{x}T = \hat{x} ; T\hat{p}T = -\hat{p} \quad (21)$$

$$H = H^{PT} = (PT)H(PT)^{-1} = PTHPT \quad (22)$$

Quando o hamiltoniano respeita a equação 22, significa que H é PT **simétrico**. É visto na literatura que esse conceito substitui a definição $H = H^\dagger$ descrita por Dirac. Portanto, isso torna-se válido e concretizado para a teoria quântica. O intuito do presente texto não

converge ao tratamento dessa simetria PT , mas é importante ser descrita para concretizar a aceitação de operadores não hermitianos na teoria quântica.

Os problemas expostos aqui apresentam os hamiltonianos descritos na forma $H(\lambda) = H_0 + \lambda H_{int}$, sendo λ parâmetro. Assim os autovalores e os autoestados $E = E(\lambda)$ e $|\psi(\lambda)\rangle$ dependem do mesmo parâmetro. O conceito de pontos excepcionais foram descritos em seção anterior desse capítulo; novamente, em suma, é um mecanismo matemático que auxilia a encontrar a TFQ, quando um determinado valor de λ faz com que dois, ou mais, níveis energéticos assumam mesmo valor. Os valores de λ são fundamentais para a determinação do fenômeno TFQ. Quando H_0 ou H_{int} são autoadjuntos, a única solução para λ ser um ponto excepcional é estar contido no conjunto dos números complexos \mathbb{C} ; conseqüentemente, $H(\lambda)$ não é hermitiano (HEISS, 2004).

Para exemplo do estudo de operadores não hermitianos, tomemos uma matriz H 2x2 e considerando H_0 e H_{int} matrizes autoadjuntas.

$$H(\lambda) = \begin{bmatrix} \omega_1 & 0 \\ 0 & \omega_2 \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} \epsilon_1 & \delta \\ \delta & \epsilon_2 \end{bmatrix} \quad (23)$$

em que todas as quantidades estão expostas na equação 23 são reais, exceto λ . A partir daí encontram-se os autovalores na equação 24.

$$E_{\pm} = \frac{(\omega_1 + \omega_2) + \lambda(\epsilon_1 + \epsilon_2)}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega_1 - \omega_2 + \lambda(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{2}\right)^2 + \lambda^2 \delta^2} \quad (24)$$

Permitindo-se λ complexo, os pontos excepcionais λ ocorrem quando o número de soluções $E(\lambda)$ se altera, passando neste caso simples de dois para apenas um autovalor. Isto, no conceito de problemas que admitem a noção de simetria de reversão temporal, ocorre quando

$$\left(\frac{\omega_1 - \omega_2 + \lambda(\epsilon_1 - \epsilon_2)}{2}\right)^2 + \lambda^2 \delta^2 = 0 \quad (25)$$

O que acarreta

$$\lambda = \frac{(\omega_1 - \omega_2)}{(\epsilon_1 - \epsilon_2) \pm i2\delta} \quad (26)$$

Para matrizes $H(\lambda)$ de ordem $n \times n$, a determinação analítica de λ não é possível, mas pode ser feita numericamente com uma varredura sobre os valores de λ no plano complexo, ou como será apresentado aqui, explorando-se as soluções de sistemas como o dado em 13.

Nas seções seguintes, são apresentados tópicos dos modelos Curie-Weiss que representam os sistemas físicos trabalhados, de modo a se apresentarem em forma adaptada à exploração das ideias esboçadas nas seções anteriores.

2.4 Os Modelos Curie-Weiss

Antes de especificar cada um dos modelos Curie-Weiss, é importante conhecer um mecanismo que possibilita demonstrar a expressão para os hamiltonianos para cada modelo.

2.4.1 As Transformações Holstein-Primakoff

Em certos modelos Curie-Weiss, que serão apresentados a seguir, é simplificador utilizar operadores de momento angular, J_z , J_+ e J_- , apenas. Eles agem em estados com momento angular como definição. A ideia do trabalho de Holstein e Primakoff (HOLSTEIN; PRIMAKOFF, 1940) é reescrever operadores de spin (ou momento angular) como **operadores criação-aniquilação** de bósons. Aqui, utiliza-se a transformação inversa, de modo a expressar todos os hamiltonianos em termos de operadores momento angular apenas.

2.4.2 A álgebra $SU(2)$

Na forma mais geral, há a álgebra $SU(n)$ que é determinada como condições que algumas transformações devem respeitar. Há $n^2 - 1$ operadores independentes que geram a álgebra $SU(n)$.

Para analisar a **álgebra** $SU(2)$, é necessário definir um grupo de 3 operadores ($2^2 - 1$) que são escritos, pela representação matricial a seguir (HALZEN; MARTIN, 2008).

$$SU(2) = \left\{ \begin{bmatrix} i\alpha & -\bar{\gamma} \\ \gamma & -i\alpha \end{bmatrix} / \alpha, \gamma \in \mathbb{C}, |\alpha|^2 + |\gamma|^2 = 1 \right\} \quad (27)$$

A partir da equação 27 é possível gerar os operadores pertencentes ao grupo $SU(2)$ pelas matrizes:

$$u_1 = \begin{bmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{bmatrix}, u_2 = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \text{ e } u_3 = \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix}. \quad (28)$$

A matrizes de Pauli, σ_1, σ_2 e σ_3 podem ser definidas; $u_1 = i\sigma_1$, $u_2 = -i\sigma_2$ e $u_3 = \sigma_3$. Os operadores J_z , J_+ e J_- são operadores que fazem parte do grupo $SU(2)$ e definidos pelas relações de comutação $[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}$ e $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$.

2.4.3 As transformações Holstein-Primakoff

Uma vez já introduzidos os operadores de momento angular, é importante expor suas operações em um estado. O estado $|jm\rangle$ aqui é determinado pelos valores j de momento angular e m do autovalor de J_z . O momento angular j pode assumir apenas valores (semi)inteiros, e os valores possíveis de m são $-j, -j+1, \dots, +j$. Então, para dado valor j , a representação desses estados pode ser feita como $|m\rangle$ pela notação de Dirac. As três equações a seguir mostram os autoestados e autovalores das aplicações dos operadores, tomando $\hbar = 1$.

$$J_z|m\rangle = m|m\rangle, \quad (29)$$

$$J_+|m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}|m+1\rangle, \quad (30)$$

$$J_-|m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|m-1\rangle. \quad (31)$$

No trabalho de Holstein e Primakoff, o valor $n \in \mathbb{N}$ é definido como a distância entre o valor m dessa componente z de um momento angular que o estado expressa, e o valor máximo dessa componente, $+j$.

$$n = j - m \quad (32)$$

Assim, no trabalho de Holstein e Primakoff, ao autoestado $|m\rangle$ do operador J_z podia ser associado o autoestado $|\Psi_n\rangle$ de um operador número bosônico $\bar{N} = b^\dagger b$, como será visto adiante. Nesta dissertação, o valor de n será a distância entre o valor do componente z do estado e o menor valor possível dessa componente. Então, diferentemente da equação 32, tem-se a equação abaixo definindo o valor de n :

$$n = j + m. \quad (33)$$

Assim n assume valores de 0 (quando $m = -j$) até $2j$ (quando $m = +j$). Ainda é praticável a ideia original. Nesse esquema, temos os estados $|\Psi_0\rangle = |-j\rangle$ e $|\Psi_{2j}\rangle = |+j\rangle$. Tomando os operadores bosônicos criação e aniquilação b^\dagger e b , respectivamente, assim como suas aplicações no estado desenvolvido nos parágrafos anteriores,

$$b^\dagger|\Psi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\Psi_{n+1}\rangle \quad (34)$$

$$b|\Psi_n \rangle = \sqrt{n}|\Psi_{n-1} \rangle, \quad (35)$$

chamamos **operador número** \hat{N} de tal forma que sua operação resulta na seguinte maneira:

$$\hat{N}|\Psi_n \rangle = b^\dagger b|\Psi_n \rangle = (jI + J_z)|\Psi_n \rangle \quad (36)$$

Com a equação 29 e sabendo que \mathbb{I} é a matriz identidade, tem-se.

$$\hat{N}|\Psi_n \rangle = (j + m)|\Psi_n \rangle = n|\Psi_n \rangle. \quad (37)$$

As transformações propostas por Holstein e Primakoff já começam a se formar quando se rescreve as equações 30 e 31 com o novo conceito de $m = n - j$, demonstrado nas equações a seguir:

$$J_+|\Psi_n \rangle = \sqrt{j(j+1) - (n-j)(n-j+1)} |\Psi_{n+1} \rangle, \quad (38)$$

$$J_+|\Psi_n \rangle = \sqrt{(n+1)}\sqrt{2j-n} |\Psi_{n+1} \rangle. \quad (39)$$

usando as equações 38 e 39, tem-se

$$J_+|\Psi_n \rangle = b^\dagger \sqrt{j\mathbb{I} - J_z} |\Psi_n \rangle \quad (40)$$

A inversa do operador $\sqrt{j\mathbb{I} - J_z}$ é $\frac{1}{\sqrt{j\mathbb{I} - J_z}}$. E sua operação, respeitando as regras de álgebra linear, resulta na equação 41.

$$b^\dagger|\Psi_n \rangle = J_+ \frac{1}{\sqrt{j\mathbb{I} - J_z}} |\Psi_n \rangle. \quad (41)$$

Conclui-se que.

$$b^\dagger = J_+ \frac{1}{\sqrt{j\mathbb{I} - J_z}}. \quad (42)$$

Processo semelhante é feito para o operador J_- . A partir da equação 31,

$$J_-|\Psi_n \rangle = \sqrt{j(j+1) - (n-j)(n-j-1)} |\Psi_{n-1} \rangle, \quad (43)$$

$$J_-|\Psi_n \rangle = \sqrt{n}\sqrt{2j - (n-1)} |\Psi_{n-1} \rangle, \quad (44)$$

tem-se então

$$J_- |\Psi_n\rangle = \sqrt{j\mathbb{I} - J_z} b |\Psi_n\rangle. \quad (45)$$

Aplicando a inversa, $\frac{1}{\sqrt{j\mathbb{I} - J_z}}$, nos dois lados da equação 46, temos

$$b |\Psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{j\mathbb{I} - J_z}} J_- |\Psi_n\rangle, \quad (46)$$

concluindo-se que

$$b = \frac{1}{\sqrt{j\mathbb{I} - J_z}} J_-. \quad (47)$$

Resumidamente, tem-se as expressões dos operadores criação e aniquilação de bósons escritos apenas em função dos operadores de momento angular. A tabela abaixo pode ser consultada para melhor representar alguns modelos que serão fundamentados na próxima sessão.

| Operador definido | expressão em função de operadores $SU(2)$ |
|-------------------|---|
| b | $\frac{1}{\sqrt{j\mathbb{I} - J_z}} J_-$ |
| b^\dagger | $J_+ \frac{1}{\sqrt{j\mathbb{I} - J_z}}$ |
| $b^\dagger b$ | $j\mathbb{I} + J_z$ |

2.4.4 O modelo Lipkin

O modelo Lipkin-Meshkov-Glick, mais comumente conhecido como modelo Lipkin, originou-se na física nuclear como estudo para aproximação em sistemas de muitos corpos. De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, diferentes férmions (entidade com valor de spin semi-inteiro) devem ser definidos com pelo menos um número quântico distinto. Considera-se um sistema com uma quantidade N de férmions que podem ocupar dois níveis discretos de energia possíveis cuja diferença energética é dada como ϵ . Atribui-se os valores $\sigma = 1$ e $\sigma = -1$ para representar os níveis superior e inferior, respectivamente. Cada férmion recebe também um valor $k = \{1, 2, 3, \dots, N\}$. Portanto, um férmion é definido com um par dos valores (k, σ) . Diz-se que esse é um problema de dois níveis, por consideração que não há nenhum outro nível possível e se há, está muito distante dos dois contidos no sistema.

As interações ocorrem sempre aos pares de férmions que passam de um nível energético para outro respeitando certas condições. Essas podem ser entendidas quando se analisa o operador hamiltoniano na equação 48.

Temos $a_{k\sigma}^\dagger$ e $a_{k\sigma}$ como operadores criação e aniquilação do férmion definidos como (k, σ) , respectivamente. Ou seja, quantificam a saída ou a chegada de certo férmion na camada σ .

$$H = \frac{1}{2}\epsilon \sum_{k\sigma} \sigma a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \frac{1}{2}V \sum_{kk^*\sigma} a_{k\sigma}^\dagger a_{k^*\sigma}^\dagger a_{k^*(-\sigma)} a_{k(-\sigma)} \quad (48)$$

O primeiro termo do lado direito da equação 48 contabiliza a energia associada apenas à quantidade de férmions em cada nível de energia, pois os operadores a^\dagger e a atuam no mesmo par de valores. O segundo termo do lado direito representa a passagem de dois férmions com números quânticos diferentes (k e k^*) e σ iguais para outro nível mantendo seus números quânticos. Mais formalmente, o par de férmions definido como $(k, -\sigma)$ e $(k^*, -\sigma)$ é transformado em (k, σ) e (k^*, σ) , respectivamente.

Os operadores pseudo-spin $SU(2)$, J_z e J_\pm são definidos nas equações 50 e tal como uma combinação de operações de criação e aniquilação referentes a um férmion.

$$J_- = \sum_k a_{k(-1)}^\dagger a_{k(+1)} \quad (49)$$

$$J_+ = \sum_k a_{k(+1)}^\dagger a_{k(-1)} \quad (50)$$

$$J_z = \frac{1}{2} \sum_{k\sigma} \sigma a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \quad (51)$$

Com essas definições, J_+ , J_- e J_z satisfazem as relações de comutação de momento angular, e o operador hamiltoniano se torna:

$$H = \epsilon J_z + \frac{1}{2} V (J_+^2 + J_-^2). \quad (52)$$

Como o objetivo é determinar a transição de fase quântica, usaremos a forma (HEISS; SCHOLTZ; GEYER, 2005):

$$H = J_z + \frac{\lambda}{2N} (J_+^2 + J_-^2). \quad (53)$$

Para esse modelo, o valor do momento angular j é determinado pela quantidade de partículas. Tem-se $j = \frac{N}{2}$.

A transição de fase é caracterizada, nesse modelo, como a passagem de todos os férmions para o estado mais fundamental $\sigma = -1$ ou para o estado mais elevado $\sigma = +1$. É possível visualizar pela instrução do hamiltoniano que é contabilizado a energia quando a transição ocorre.

2.4.5 O modelo Emparelhamento

O modelo emparelhamento trata a interação entre pares de partículas (férmions) que interagem em um sistema com duas camadas, níveis degenerados, com momentos angulares

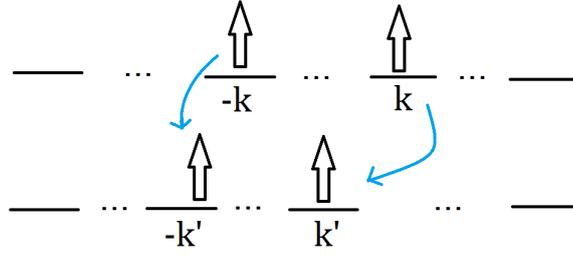


Figura 4 – Esquema referente a um exemplo de transição dos pares de férmions segundo o modelo emparelhamento. As setas para cima são os férmions e as setas azuladas indicam a transição.

iguais ou opostos. Cada partícula que pertence a uma das camadas, assim como utilizado no modelo Lipkin, é definida pelo valor de $\sigma \in \{-1, 1\}$. Chamam-se partículas com momento angular j_1 e j_2 aquelas que são determinadas com $\sigma = -1$ e $\sigma = +1$, respectivamente. O sistema com N férmions definidos com os valores quânticos k contém a quantidade de energia ϵ como a diferença energética entre as camadas. O valor de k representa o valor da componente z do momento angular. Apesar da semelhança apresentada com o modelo anterior, as partículas podem mudar de k de forma que um par representado por $(k, -k)$ passa para os valores $(k', -k')$.

Essa relação de interação pode ser modelada pela a equação 54.

$$H = \frac{1}{2}\epsilon \sum_{k\sigma} \sigma a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} - \frac{1}{4}\lambda \sum_{k\sigma} a_{k\sigma}^\dagger a_{\bar{k}\sigma}^\dagger \sum_{k'\sigma'} a_{\bar{k}'\sigma'} a_{k'\sigma'} \quad (54)$$

em que os operadores criação e aniquilação são representados por a^\dagger e a , respectivamente. Os operadores $SU(2)$ são definidos nas equações 55, 56, 57 e 58 em dois conjuntos, um para cada camada. Assim, entregam a forma do operador hamiltoniano, escrito na equação 59.

$$J_{1+} = \sum_{k>0} a_{k(-1)}^\dagger a_{\bar{k}(-1)}^\dagger = J_{1-}^\dagger \quad (55)$$

$$J_{1z} = \frac{1}{2} \sum_k a_{k(-1)}^\dagger a_{k(-1)} - \frac{N}{4} \quad (56)$$

$$J_{2+} = \sum_{k>0} a_{k(+1)}^\dagger a_{\bar{k}(+1)}^\dagger = J_{2-}^\dagger \quad (57)$$

$$J_{2z} = \frac{1}{2} \sum_k a_{k(+1)}^\dagger a_{k(+1)} - \frac{N}{4} \quad (58)$$

Para α e β assumindo qualquer um desses símbolos: +, - e z , $J_{1\alpha}$ e $J_{2\beta}$ são operadores que comutam um com o outro, $[J_{1\alpha}, J_{2\beta}] = 0$.

$$H = \epsilon(J_{2z} - J_{1z}) - \frac{\lambda}{N}(J_{2+} + J_{1+})(J_{2-} + J_{1-}) \quad (59)$$

O modelo emparelhamento, assim como o modelo Lipkin, é caracterizada com a mudança de níveis energéticos. Nesse caso, a transição de fase quântica é dada pela troca de nível energético σ de todas as partículas e da posição N .

2.4.6 O modelo Bicamada

No modelo bicamada, o éxciton é o bóson em questão e é formado quando um par de férmions em camadas diferentes é ligado (EISENSTEIN, 2003).

O operador hamiltoniano para esse modelo, na equação 60 é proposto para simular esse sistema e os operadores b^\dagger e b referem-se aos bósons e, assim como nos modelos anteriores, os operadores a^\dagger e a são referentes aos férmions. Posto que a formação de éxciton provém de um par de férmions, aparece $\frac{N}{2}$ como a quantidade de bósons formados de acordo com a quantidade de N férmions.

$$H = \delta b^\dagger b + \lambda \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}} (a_{k1}^\dagger a_{k2}^\dagger b + b^\dagger a_{k2} a_{k1}) \quad (60)$$

Na equação 60, há δ e seu valor representa o valor energético dos bósons do sistema que será considerado como unitário ($\delta = 1$). As operações de implementação dos operadores criação e aniquilação devolvem as quantidades de éxcitons e partículas, representados dessa forma $b^\dagger b | \frac{N}{2} \rangle = \frac{N}{2} | \frac{N}{2} \rangle$ e $a^\dagger a | N \rangle = N | N \rangle$ pela notação de Dirac.

Na equação 60, seu primeiro termo demonstra a energia carregada pelos éxcitons já presentes no sistema. A somatória da mesma equação pode ser explicada pelo "desaparecimento" de 2 férmions formando um bóson, no segundo termo e o primeiro termo indica a parcela energética de um éxciton transformando-se em dois férmions. Logicamente, isso pode acontecer $\frac{N}{2}$ vezes, como é indicado pelo índice superior da somatória.

Assim como nos modelos anteriores, é possível determinar os operadores pseudo-spin com o intuito de se reescrever o operador hamiltoniano.

$$J_{1+} = \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}} a_{k1}^\dagger a_{k1} = J_{1-}^\dagger, \quad (61)$$

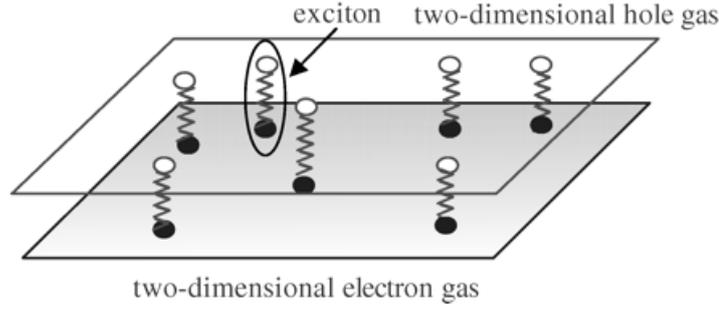


Figura 5 – Esquema representando um sistema estudado pelo modelo bicamada. Os éxcitons (excitons, em inglês) são representados como a atração das partículas representados pelos círculos preenchidos e não preenchidos para diferenciar as camadas de gás bidimensional (two-dimensional hole gas). Fonte: (BERMAN et al., 2010)

$$J_{1z} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}} (a_{k1}^\dagger a_{k1} + a_{k2}^\dagger a_{k2}) - \frac{N}{4}. \quad (62)$$

Assim como os operadores apresentados pelo trabalho de Holstein-Primakoff (HOLSTEIN; PRIMAKOFF, 1940).

$$b^\dagger b = J_2 \hat{1} + J_{2z}, \quad (63)$$

$$b^\dagger = J_{2+} \frac{1}{\sqrt{J_2 \hat{1} - J_{2z}}}, \quad (64)$$

e

$$b = \frac{1}{\sqrt{J_2 \hat{1} - J_{2z}}} J_{2-}. \quad (65)$$

Substituindo as equações apresentadas logo acima na equação hamiltoniana 60, tem-se

$$H = (J_2 \hat{1} + J_{2z}) + \frac{\lambda}{\sqrt{N}} (J_{1+} \frac{1}{\sqrt{J_2 \hat{1} - J_{2z}}} J_{2-} + J_{2+} \frac{1}{\sqrt{J_2 \hat{1} - J_{2z}}} J_{1-}) \quad (66)$$

Nesse modelo, $N = 4j_2$, em que j_2 é o momento angular associado aos éxcitons.

Quando todos os pares de férmions possíveis de formar éxciton são aniquilados para a formação do número máximo de bósons que o sistema pode ter, é considerado que esse processo é a transição de fase quântica para o modelo bicamada.

2.4.7 O modelo Jaynes-Cummings com N átomos

O sistema a ser estudado no modelo Jaynes-Cummings considera um conjunto de N átomos de dois níveis possíveis. Os átomos sofrem influência de um campo de radiação com frequência ω_0 e de acordo com a equação de Planck, a energia que o fóton do campo carrega vale $E_{campo} = \hbar\omega_0 = \epsilon$. Determina-se que a diferença energética entre os dois

níveis de energia é ϵ . Esse trabalho considera o nível mais baixo como $E_{particula} = 0$ e o nível mais alto como $E = \epsilon$. Para a partícula que está presente no nível de mais baixo valor energético, diz-se que se encontra no estado fundamental e para as que estão no nível energético mais alto, diz-se que estão no estado excitado.

As descrições das transformações obedecem o mecanismo de passagem de férmions de um estado para outro, quando se é adicionado ou removido um bóson (fóton) no sistema. Apenas são consideradas transformações em que há a conservação de energia do sistema, então quando um fóton é aniquilado, uma partícula deve partir do estado fundamental para o estado excitado ou vice-versa quando um fóton é criado no campo de radiação.

Para entender o Hamiltoniano do sistema, é necessário entender a energia que o átomo carrega. Com isso, é utilizado o operador de spin de Pauli $\hat{\sigma}_z$, exposto como matriz na equação 67. As operações com partículas no estado excitado $|e\rangle$ e no estado fundamental $|f\rangle$, como vetores de espaços de Hilbert, são também descritos como matrizes de acordo com

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (67)$$

$$|e\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (68)$$

e

$$|f\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (69)$$

Assim, qualquer atuação do operador $\hat{\sigma}_z$ sobre os dois estados são,

$$\hat{\sigma}_z |e\rangle = |e\rangle \quad (70)$$

e

$$\hat{\sigma}_z |f\rangle = -|f\rangle. \quad (71)$$

Considera-se o estado como uma combinação desses outros dois apresentados (base de Hilbert). Chama-se qualquer vetor $|m\rangle$ como o *ket*, vetor pertencente ao espaço representado como o estado que contém a informação de quantidade de partículas que cada nível energético tem. A equação 72 traz a representação do vetor assim como sua disposição matricial, em que α reflete a amplitude de probabilidade de encontrar os átomos no estado fundamental de partículas no nível fundamental e β reflete a quantidade de partículas no nível excitado.

$$|m\rangle = \alpha |f\rangle + \beta |e\rangle = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix} \quad (72)$$

. As equações 67, 68, 69, 70 e 71 ajudam a definir o operador hamiltoniano seguinte.

$$\hat{H}_{\text{atômico}} = \frac{\epsilon}{2}(\hat{\sigma}_z + \hat{1}) \quad (73)$$

O operador hamiltoniano dado na equação 73 apenas devolve como autovalor o valor de energia relacionada aos átomos referente a posições de cada partícula em um determinado nível de energia, ou seja, ainda não se apresenta como um modelo completo para representar o sistema em questão, uma vez que deve ser considerada também a energia que carrega cada fóton do campo de radiação a que o sistema é sujeito. Há outros estados possíveis em comparação com a base de Hilbert da consideração anterior. A base de Hilbert para o campo de radiação é o vetor $|n\rangle$ tal que $n \in \mathbb{N}$ signifique a quantidade de fótons. Como exemplo, devemos considerar $|0\rangle$ como a ausência de fótons, o vácuo. A base de Hilbert para todo o sistema é tida como dois valores provindos das bases referentes ao átomo ($B_{\text{átomo}}$) e ao campo (B_{campo}). Na equação 74 há a base de Hilbert do sistema em estudo (B).

$$B = B_{\text{átomo}} \otimes B_{\text{campo}}. \quad (74)$$

O hamiltoniano do campo de radiação é descrito na equação 75.

$$\hat{H}_{\text{campo}} = \epsilon b^\dagger b. \quad (75)$$

É possível observar que na equação 74 a representação $|mn\rangle$ se mostra completa pois tem informação suficiente para demonstrar os níveis energéticos e quantidade de fótons. O hamiltoniano completo do modelo Jaynes-Cummings é tido como a soma de $\hat{H}_{\text{átomo}}$ com \hat{H}_{campo} e \hat{H}_{int} . Como já foi dito no início dessa seção, as únicas interações consideradas nesse trabalho são aquelas em que a energia é conservada. Mencionado isso, \hat{H}_{int} fica,

$$\hat{H}_{\text{int}} = \lambda(bJ_+ + b^\dagger J_-) \quad (76)$$

Da mesma maneira que nos modelos anteriores, λ simboliza o parâmetro de interação. O primeiro termo da equação 76 diz que a perda de fótons do campo de radiação resulta em uma partícula que passa do estado fundamental para o estado excitado.

Para o Hamiltoniano em termos de momento angular e aplicando as transformações, temos

$$H = J_2 \hat{1} + (J_{1z} + J_{2z}) + \frac{\lambda}{\sqrt{N}} \left(\frac{1}{\sqrt{J_2 1 - J_{2z}}} J_{2-} J_{1+} + J_{2+} \frac{1}{\sqrt{J_2 1 - J_{2z}}} J_{1-} \right) \quad (77)$$

em que os operadores J_{1z} e $J_{1\pm}$ referem-se aos átomos e em que os operadores J_{2z} e $J_{2\pm}$ são obtidos a partir dos operadores criação e aniquilação para o campo, pela transformação de Holstein e Primakoff.

A transição de fase quântica desse modelo é caracterizada pela passagem de todas as partículas do estado fundamental para o estado excitado ou vice-versa, quando o sistema recebe uma influência energética exterior.

2.4.8 O modelo Heisenberg

Em sistemas magnéticos onde há uma quantidade de átomos e seu valor de spin é uma característica intrínseca da matéria, estados em que os spins, de forma coletiva, apresentam uma tendência de se alinharem em direções iguais, define-se como sistemas ferromagnéticos. Por outro lado, define-se antiferromagnético quando os spins se encontram em paralelo com seus vizinhos porém, com direções opostas.

Para estudos teóricos de magnetismo é utilizado o modelo Heisenberg. O sistema contém N átomos e é submetido a um campo externo. Esse é mais um exemplo de modelo que leva em conta interações (spin-spin). Assim como Lipkin e Jaynes-Cummings, apresentados anteriormente, o modelo Heisenberg oferece uma linha de pesquisa muito ampla, que associa vários tipos de interações possíveis: spin-spin, spin-partícula, spin-campo magnético (PELLEGRINO et al., 1994).

O Hamiltoniano 78 é dado por produtos de 2 spins, \vec{S}_1 e \vec{S}_2 , e J aqui nesse modelo é a simplificação da constante de troca, em que $J > 0$ para caso antiferromagnético e $J < 0$ para caso ferromagnético. No presente trabalho considera-se que $J = 1$.

$$H = JS_1S_2 + \alpha S_1^z S_2^z, \quad (78)$$

Onde α é um número real chamado de parâmetro de **anisotropia**. O vetor \vec{S}_i é definido como sua aplicação vetorial $\vec{S}_i = \{S_x, S_y, S_z\}$. As definições de S_i^\pm são importantes para expressar o hamiltoniano na sua forma mais comum encontrada na literatura.

$$S_i^\pm = S_x \pm iS_y \quad (79)$$

e

$$S_x = \frac{S^+ + S^-}{2} \quad (80)$$

assim como,

$$S_y = \frac{S^+ - S^-}{2i} \quad (81)$$

Logo o trio de operadores $\{S_x, S_y, S_z\}$ pode ser substituído na expressão do hamiltoniano por $\{S_z, S^+, S^-\}$, em que são conhecidos os autoestados de cada operação desse

último conjunto. $S_z|Sm \rangle = m|Sm \rangle$ e $S^\pm|Sm \rangle = \sqrt{S(S+1) - m(m \pm 1)} |S(m \pm 1) \rangle$.
Rearranjando a equação 78, pode-se agora escrever na forma

$$H = S_{1z}S_{2z} + \left(\frac{1}{1+\alpha} \right) \frac{(S_1^+S_2^- + S_1^-S_2^+)}{2}. \quad (82)$$

Na equação 82 o hamiltoniano está na forma proposta da equação 2. $\frac{1}{1+\alpha}$ é a expressão para λ .

Quando um sistema, fundamentado pelo modelo Heisenberg, sofre a transição de fase quântica, significa que o sistema passa do comportamento paramagnético para ferromagnético ou do estado antiferromagnético para o ferromagnético.

* * *

É importante enfatizar que todos os modelos podem ser expressos na forma da equação 2. Porém apenas o modelo Heisenberg leva $H_0 \propto J_z^2$. Os outros modelos apresentam a proporção $H_0 \propto J_z$.

Capítulo 3

Resultados

Os resultados que serão expostos nesse capítulo têm como finalidade mostrar o comportamento dos pontos excepcionais de acordo com a variação do momento angular e também oferecer uma coleção de interpretações gráficas para clarear o comportamento dos pontos excepcionais relativamente a TFQ. A equação 53 e o conhecimento das operações J_z , J_+ e J_- , apresentadas na seção 2.4.3, são fundamentais para entender os resultados aqui colocados.

Até onde sabemos, o único modelo em que se tem estudo semelhante a esta dissertação, é o modelo Lipkin. Mas acredita-se que é possível aplicar o mesmo método para os outros modelos Curie-Weiss, uma vez que eles têm seus hamiltonianos apresentados de forma semelhante ao que o modelo Lipkin apresenta, por efeito das transformações de Holstein e Primakoff.

Primeiramente, os resultados que entregam uma visão mais geral dos pontos excepcionais serão expostos. Entre eles, a dependência da quantidade de pontos excepcionais pelo momento angular do sistema quântico, uma análise pela perspectiva do plano dos autovalores (níveis de energia) de acordo com o parâmetro λ e também a noção de como os pontos excepcionais são distribuídos pelo plano complexo \mathbb{C} , à medida que o momento angular j do sistema varia. Posteriormente, a atenção irá ser voltada para a determinação da tendência dos pontos excepcionais quando $j \rightarrow \infty$ pois, como a teoria define, essa tendência se caracteriza como a transição de fase quântica. Vai ser também apresentado um método de ajuste de curvas para ajudar tal caracterização.

3.1 Os Pontos Excepcionais do Modelo Lipkin

Como já foi introduzido na seção 2.4.4, a dimensão do espaço de Hilbert $\dim B$ é N e ela é dada na forma $N = 2j + 1$ tal que j é o valor do momento angular. Foram atribuídos valores naturais de 1 a 10, portanto a dimensão da base foi de 3 a 21 elementos.

O hamiltoniano H , com representação matricial de tamanho $N \times N$, é dado pelo comando da equação 53. Foi exposta na seção sobre as transformações de Holstein e Primakoff a ação dos operadores J_+ , J_- e J_z e suas interações com o vetor do espaço de Hilbert $|m\rangle$. J_+^2 e J_-^2 , como são dados na instrução do hamiltoniano, são tais que

$$J_+^2|m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\sqrt{j(j+1) - (m+1)(m+2)}|m+2\rangle \quad (83)$$

assim como,

$$J_-^2|m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\sqrt{j(j+1) - (m-1)(m-2)}|m-2\rangle. \quad (84)$$

Ainda levando em conta a ortonormalidade,

$$\langle m|J_+^2|n\rangle = \begin{cases} 0, & \text{se } m \neq n+2 \\ \sqrt{j(j+1) - n(n+1)}\sqrt{j(j+1) - (n+1)(n+2)}, & \text{se } m = n+2 \end{cases} \quad (85)$$

Assim como,

$$\langle m|J_-^2|n\rangle = \begin{cases} 0, & \text{se } m \neq n-2 \\ \sqrt{j(j+1) - n(n-1)}\sqrt{j(j+1) - (n-1)(n-2)}, & \text{se } m = n-2 \end{cases} \quad (86)$$

Considerando as posições de elementos nas linhas k e colunas l da matriz hamiltoniana, basicamente os fatores multiplicativos do operador J_z só apareceram na diagonal principal; os fatores multiplicativos do operador J_+^2 só apareceram em elementos $H_{k(k-2)}$ e fatores multiplicativos relacionados ao operador J_-^2 só apareceram em elementos $H_{k(k+2)}$. Denomina-se, **especialmente neste trabalho**, esse tipo como matriz de tridiagonal intercalada.

De acordo com o que já foi introduzido sobre os pontos excepcionais, é necessário calcular o polinômio característico. Foram encontradas barreiras na implementação computacional desse tipo de matriz. No anexo A é apresentada uma equação de recorrência para calcular o determinante de uma matriz desse tipo. Isso pode ser útil para trabalhos futuros que tenham como objetivo trabalhar o do modelo Lipkin.

Na tabela 1, são determinadas as quantidades de pontos excepcionais associadas a cada valor de j experimentado.

Plotando e interpolando os pontos dados na tabela 1, encontra-se uma lei dada por uma equação quadrática (figura 6). Ela é dada por $N_{PE} = j^2 + j - 6.3 \cdot 10^{-15}$. Pode-se considerar pelos resultados a indagação da instrução $N_{PE} = j(j+1)$, já que o coeficiente livre da equação é muito pequeno e pode ser ignorado.

Com o objetivo de ilustrar o comportamento dos autovalores no plano complexo \mathbb{C} , quando foram coletados os pontos excepcionais para $j = 3$, foi escolhido um deles e se adotou

Tabela 1 – Resultado dos testes para modelo Lipkin

| Valor do momento angular | Quantidade de pontos excepcionais | Dim |
|--------------------------|-----------------------------------|-----|
| 1 | 2 | 3 |
| 2 | 6 | 5 |
| 3 | 12 | 7 |
| 4 | 20 | 9 |
| 5 | 30 | 11 |
| 6 | 42 | 13 |
| 7 | 56 | 15 |
| 8 | 72 | 17 |
| 9 | 90 | 19 |
| 10 | 110 | 21 |

outros dois pontos para λ que não são pontos excepcionais. Então, verifica-se que realmente o número de autovalores distintos é alterado quando o parâmetro é ponto excepcional. Isso pode ser visto na figura 7. Essa figura mostra três exemplos de uma mesma região do plano dos autovalores mas quando são associados a λ não sendo ponto excepcional e λ sendo ponto excepcional. No gráfico (b), temos apenas 5 autovalores distintos enquanto os outros dois há 7 autovalores distintos.

Além dessa análise, outro resultado foi encontrado para o estudo da posições dos pontos excepcionais no plano \mathbb{C} , associado com a variação do valor de j . Foi perceptível que, de acordo com a figura 8, à medida que o momento angular j assume valores cada vez maiores, os pontos excepcionais têm parte imaginária cada vez menor. Melhor explicando, o ponto excepcional com menor parte imaginária relacionado com cada momento angular fica com essa parte menor quando j aumenta.

Até então, na literatura, as únicas formas encontradas de se apresentar os resultados foram expostas até esta seção. A figura 8 é útil pois, como foi dito no parágrafo anterior, pode-se observar nela que à medida que o valor de j cresce os pontos excepcionais recebem valores de parte imaginária cada vez menores. Então, acredita-se que há um valor real de tendência quando j é muito grande. Não obstante, em termos de analiticidade, não se tem muitas ferramentas em outros trabalhos para determinar essa tendência. Como será mais detalhado na próxima seção desse capítulo, a teoria determina que a transição de fase quântica ocorrerá quando o parâmetro atingir parte imaginária nula, o valor crítico λ_c , e portanto os pontos excepcionais deverão convergir a esse valor quando $j \rightarrow \infty$.

Então, foi proposta nesse trabalho uma nova maneira de se encarar os resultados e verificar, mesmo que de forma aproximada, os dados encontrados pela implementação, sem ficar dependendo de análise visual de gráficos.

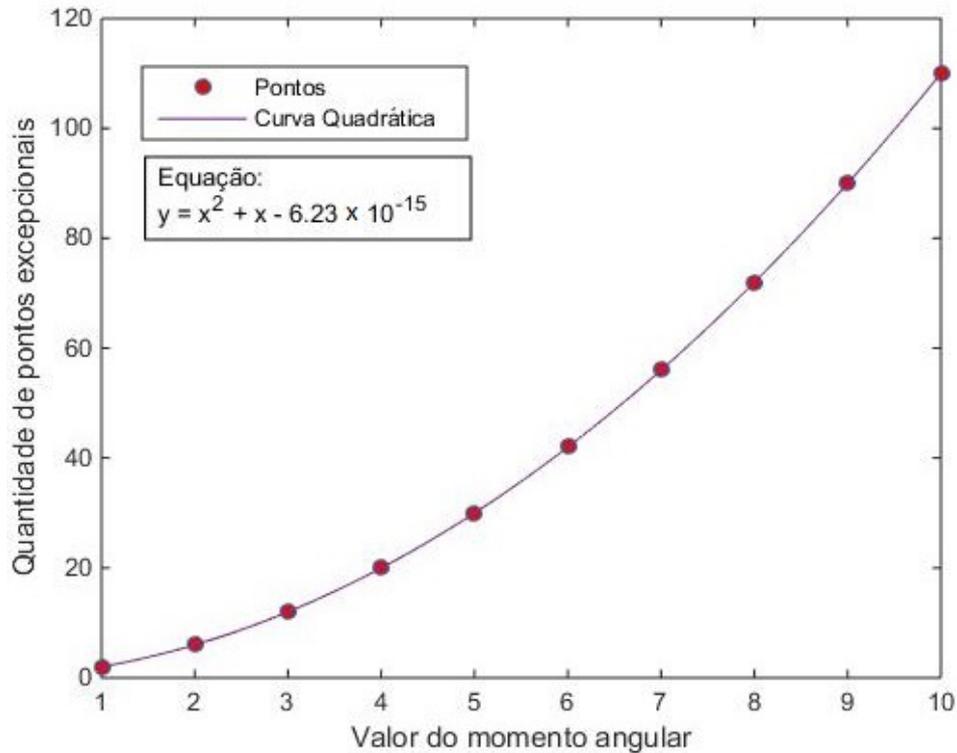


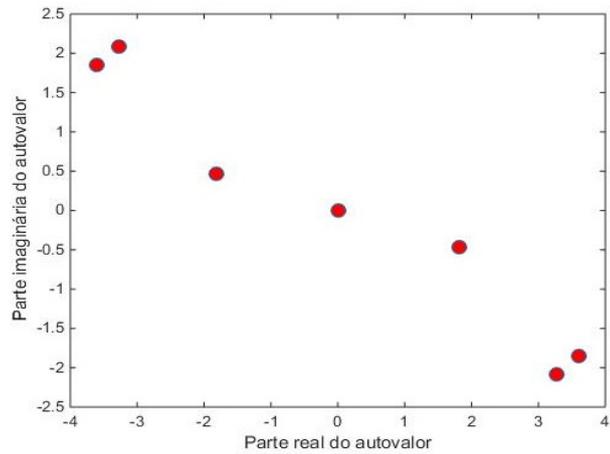
Figura 6 – Gráfico de Momento angular x Número de pontos excepcionais (N_{PE}) para o modelo Lipkin

3.2 Ajustes de Pontos

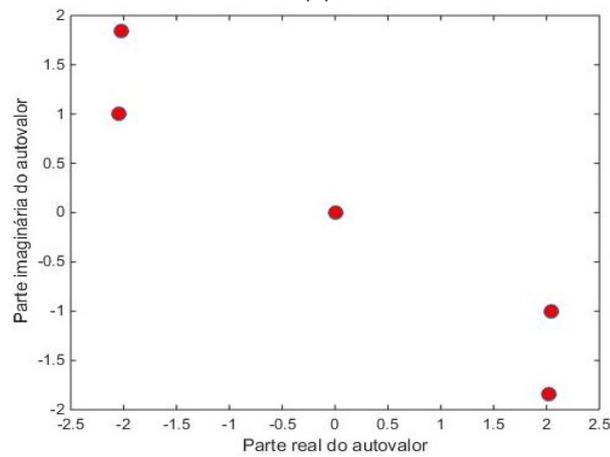
Como antes mencionado, o intuito do trabalho é determinar a transição de fase quântica a partir dos pontos excepcionais conseguidos a partir de um hamiltoniano. Como foi encontrada uma dificuldade de implementação computacional para encontrar pontos excepcionais para sistemas com j maiores do que foram apresentados, apresenta-se uma alternativa de visualização e análise dos dados coletados que são graficamente visualizados na figura 8. A grande questão que a motiva é: a qual valor do plano complexo os pontos excepcionais irão tender à medida que $j \rightarrow \infty$?

Ocorre que é bastante difícil computacionalmente o cálculo numérico dos pontos excepcionais para valores de j consideravelmente maiores que $j = 10$. Os polinômios que compõem o sistema (12), do capítulo 2, possuem graus $(2j + 1)$ e $2j$ na variável E , e graus $(2j - 1)$ e $(2j - 2)$ na variável λ .

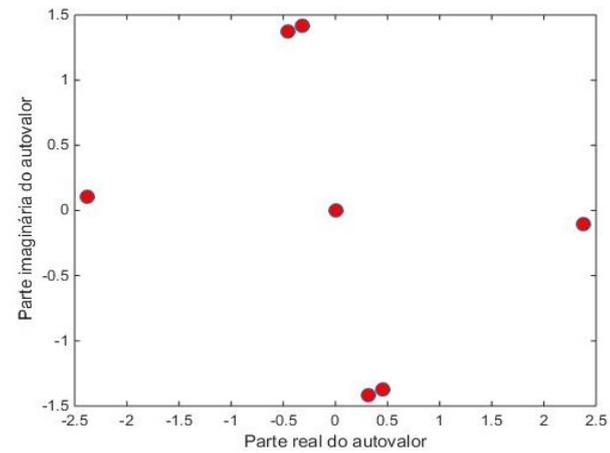
Foram selecionados pontos excepcionais presentes na figura 8 que respeitam uma restrição. Foi escolhido um ponto excepcional para cada j , aquele com menor parte imaginária. Na figura 9 é possível ver como eles foram selecionados. Claramente, a atenção continua voltada apenas para a mesma região do plano \mathbb{C} . Computacionalmente, o ajuste de curva para os pontos coletados não foi satisfatório, uma vez que é impossível haver uma função (Parte real dos pontos excepcionais \rightarrow parte imaginária dos pontos excepcionais) que



(a)



(b)



(c)

Figura 7 – Autovalores determinados em plano \mathbb{C} para o modelo Lipkin com diferentes valores do parâmetro λ : (a) $\lambda = -1 - 2i$; (b) $\lambda = -2i$ (Ponto Excepcional) ; (c) $\lambda = 1 - 2i$

respeite os dados apresentados. Visualmente é possível perceber que não há nenhuma associação definida como função que trace os pontos da figura 9.

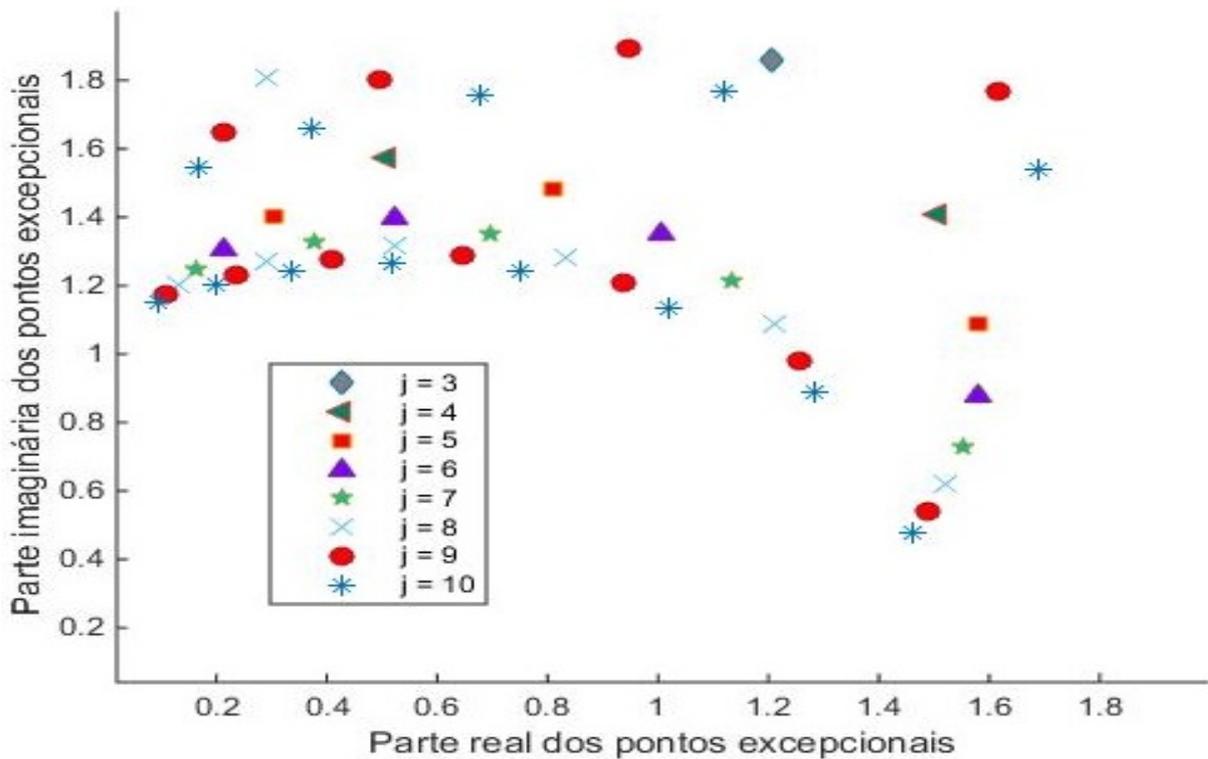


Figura 8 – Perspectiva que demonstra os pontos excepcionais no plano \mathbb{C} para modelo Lipkin

Decidiu-se que uma solução seria apresentar os dados como parte imaginária X parte real, ao invés do oposto como é a convenção. Dessa forma a ideia de plotar uma função que ligasse os dados pode ser realizada. Com isso, foi feito o ajuste de curvas, usando-se os valores dados pelos valores do momento angular de $j = 3$ a $j = 10$. Como há 8 pontos plotados, o ajuste polinomial atinge grau 7. O intuito da análise não é expressão e sim qual o valor de um coeficiente em específico. Como será visto no capítulo posterior, esses resultados são importantes para aproximar o que foi encontrado neste trabalho com a teoria de que os pontos excepcionais vão tender para o valor $1 + 0i$ (HEISS; SCHOLTZ; GEYER, 2005).

O quanto os pontos respeitam a curva ajustada é dado pelos parâmetros de ajuste com o seguinte dado, R-square: 1. "**R-square**" é conhecido como coeficiente de determinação e é uma medida de determinação de ajuste de curva e esse valor varia de 0 a 1 e representa a fração em que o modelo consegue explicar os valores ajustados. No caso do experimento visto na figura 10, o valor 1 obtido significa que os valores podem ser 100% explicados pela equação (MONTGOMERY, 2017).

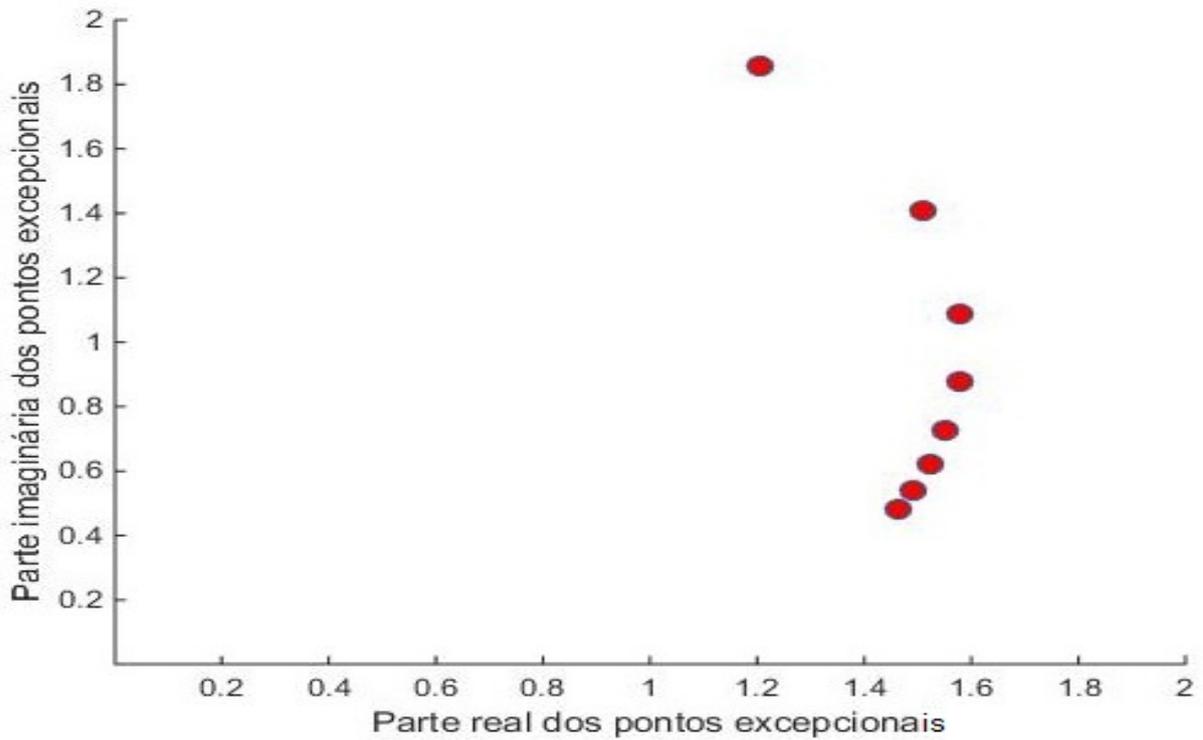


Figura 9 – Pontos excepcionais com menor parte imaginária para cada j

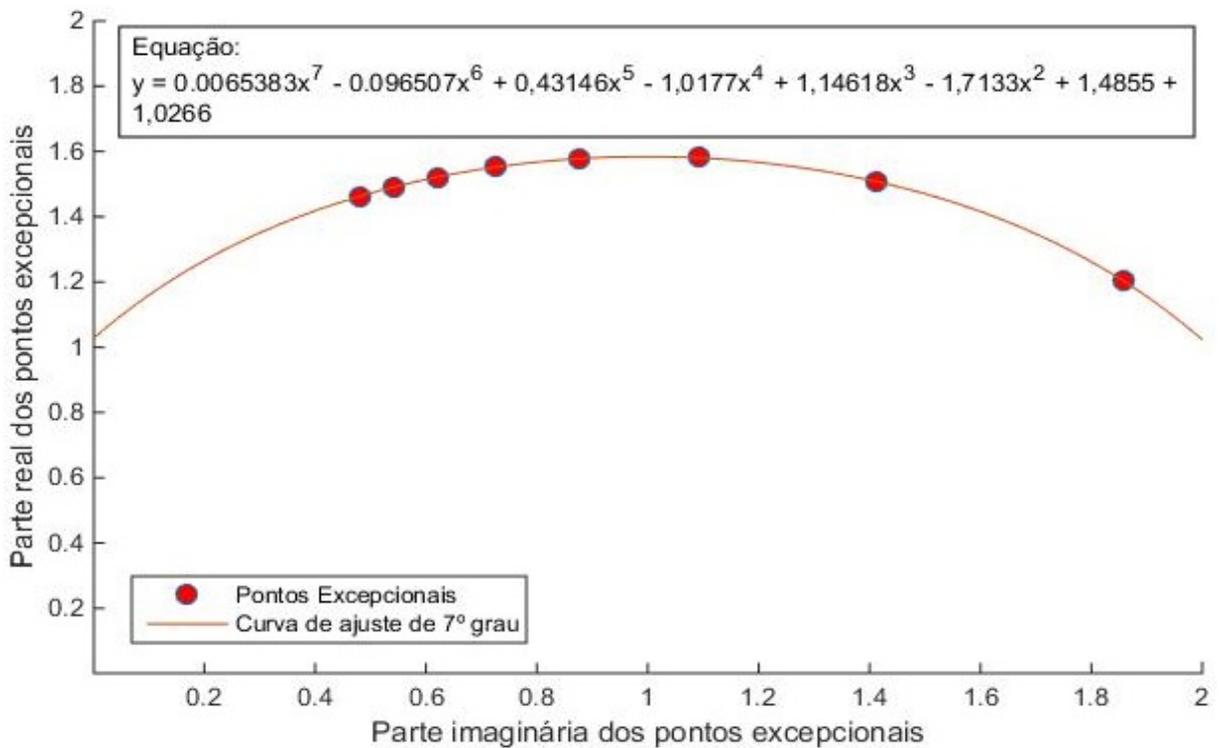


Figura 10 – Ajuste dos pontos excepcionais com valores da parte imaginária menores para cada momento angular. J varia de 3 a 10.

Capítulo 4

Conclusão

O trabalho que foi apresentado possuiu motivação em acrescentar dados à literatura sobre a mecânica dos hamiltonianos não hermitianos, estudando o fenômeno da transição de fase quântica com a definição matemática dos pontos excepcionais, e sugerir a aplicação desses estudos a vários tipos de áreas da ciências utilizando os modelos Curie-Weiss. O modelo Lipkin foi o único que entregou resultados numéricos suficientes para serem apresentados, por ser um modelo menos complexo de se lidar e por ser apresentado de forma mais abundante na literatura. Mas pelas construções dos hamiltonianos dos outros modelos da mesma classe, é possível também fazer os mesmos estudos quando as barreiras de implementação computacionais forem solucionadas em trabalhos futuros. A ferramenta de implementação que foi utilizada para gerar os dados não foi o objetivo central do trabalho; portanto, a otimização de tempo não foi procurada, mesmo necessitando mais dados para a aproximação apresentada. Como já foi dito, encontra-se no anexo A um cálculo para o determinante da matriz específica que foi trabalhada nesta dissertação, que pode ser um objeto motivador para a aprimoramento do cálculo computacional dos pontos excepcionais em atividades acadêmicas posteriores. Tem-se convicção pelo custo da implementação que o determinante é um ponto de maior demanda de tempo e memória.

Trabalhando com os pontos excepcionais e calculando-os, foi possível ver que os resultados comportam-se exatamente como a teoria dessa definição demanda, pois visualizando o plano complexo \mathbb{C} dos autovalores, o comportamento deles condizem com o que se esperava ao atingir os pontos excepcionais. Juntamente com essa conclusão, foi encontrada uma dependência quadrática direta entre a quantidade de pontos excepcionais e o valor do momento angular. Antes não era conhecida essa dependência e pelo fato de que essa associação é bem comportada, acredita-se que isso pode acarretar outras formas de se visualizar o conceito de pontos excepcionais.

O que mais se encontra na literatura que trata do assunto é a análise gráfica da mesma forma como é apresentada na figura 8. Nessa figura, encontram-se pontos que formam

um desenho muito semelhante aos dos trabalhos modelos que motivaram essa pesquisa; portanto, como os resultados até então condizem satisfatoriamente com as teorias, adicionar uma maneira de verificar os resultados foi possível. O ajuste dos pontos selecionados foi a mencionada ferramenta nova acrescentada no trabalho para verificar a tendência dos pontos excepcionais. As figuras 6 e 10 são importantes, pois a partir delas apresenta-se uma solução visual e analítica aproximada do que a teoria dos pontos excepcionais pede. Na análise dessas duas figuras, encontra-se os ajustes polinomiais e seus coeficientes. O valor do coeficiente livre do ajuste feito para a figura 10 é importante, pois é o ponto onde a curva intercepta o eixo y (parte real dos pontos excepcionais). O valor desse coeficiente é bem próximo de 1, que seria o ponto $1 + 0i$, como é encontrado na literatura o parâmetro crítico para o modelo Lipkin. Mais uma evidência de que a tendência dos pontos excepcionais é ir ao ponto onde ocorre a transição de fase quântica. A importância desse novo método de determinação vai além das equações polinomiais encontradas, mas chega a ser uma nova alternativa de análise de resultados para os estudos de pontos excepcionais e transição de fase quântica.

Referências

BENDER, C. M. Making sense of non-Hermitian Hamiltonians. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 70, n. 6, p. 947, 2007. Citado na página 2.

BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real spectra in non-Hermitian Hamiltonians having PT symmetry. **Physical Review Letters**, APS, v. 80, n. 24, p. 5243, 1998. Citado na página 2.

BERMAN, O. L. et al. Bose–Einstein condensation and superfluidity of trapped polaritons in graphene and quantum wells embedded in a microcavity. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society Publishing, v. 368, n. 1932, p. 5459–5482, 2010. Citado 2 vezes nas páginas vi e 21.

BOLDRINI, J. L. et al. **Álgebra Linear**. [S.l.]: Harper & Row, 1980. Citado na página 9.

COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum Mechanics**. [S.l.]: Wiley-VCH, 1986. Citado na página 1.

DEMANGE, G.; GRAEFE, E.-M. Signatures of three coalescing eigenfunctions. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, IOP Publishing, v. 45, n. 2, p. 025303, 2011. Citado na página 9.

EISENSTEIN, J. Evidence for spontaneous interlayer phase coherence in a bilayer quantum Hall exciton condensate. **Solid State Communications**, Elsevier, v. 127, n. 2, p. 123–130, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 20.

FISHER, M. E. Phase transitions and critical phenomena. In: **Contemporary Physics: Trieste Symposium 1968. Vol. I. Proceedings of the International Symposium on Contemporary Physics**. [S.l.: s.n.], 1969. Citado na página 3.

GRIFFITHS, D. J.; SCHROETER, D. F. **Introduction to Quantum Mechanics**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2018. Citado na página 2.

HALZEN, F.; MARTIN, A. D. **Quark & Leptons: An Introductory Course In Modern Particle Physics**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008. Citado na página 14.

HEISS, W. Repulsion of resonance states and exceptional points. **Physical Review E**, APS, v. 61, n. 1, p. 929, 2000. Citado na página 2.

HEISS, W. Exceptional points of non-Hermitian operators. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 37, n. 6, p. 2455, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 13.

HEISS, W. The physics of exceptional points. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, IOP Publishing, v. 45, n. 44, p. 444016, 2012. Citado na página 9.

HEISS, W.; MÜLLER, M.; ROTTER, I. Collectivity, phase transitions, and exceptional points in open quantum systems. **Physical Review E**, APS, v. 58, n. 3, p. 2894, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 10.

HEISS, W.; SCHOLTZ, F.; GEYER, H. The large-N behaviour of the Lipkin model and exceptional points. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 38, n. 9, p. 1843, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 31.

HOLSTEIN, T.; PRIMAKOFF, H. Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. **Physical Review**, APS, v. 58, n. 12, p. 1098, 1940. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 21.

JAYNES, E. T.; CUMMINGS, F. W. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser. **Proceedings of the IEEE**, IEEE, v. 51, n. 1, p. 89–109, 1963. Citado na página 3.

JONES-SMITH, K. A. **Non-Hermitian Quantum Mechanics**. Tese (Doutorado) — Case Western Reserve University, 2010. Citado na página 2.

KATO, T. **Perturbation theory for linear operators**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 132. Citado 3 vezes nas páginas 2, 3 e 6.

KRIEGER, S.; GOEKE, K. Application of the adiabatic, time-dependent Hartree-Bogolyubov approximation to a solvable model. **Nuclear Physics A**, Elsevier, v. 234, n. 2, p. 269–284, 1974. Citado na página 3.

LIPKIN, H. J.; MESHKOV, N.; GLICK, A. Validity of many-body approximation methods for a solvable model:(i). Exact solutions and perturbation theory. **Nuclear Physics**, Elsevier, v. 62, n. 2, p. 188–198, 1965. Citado na página 3.

MONTGOMERY, D. C. **Design and Analysis of Experiments**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2017. Citado na página 31.

MOSTAFAZADEH, A. Pseudo-Hermiticity versus PT symmetry: The necessary condition for the reality of the spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian. **Journal of Mathematical Physics**, AIP, v. 43, n. 1, p. 205–214, 2002. Citado na página 12.

PELLEGRINO, G. Q. et al. Aspectos de integrabilidade e caos relacionados a quebra de simetria em modelos de poucos spins. [sn], 1994. Citado na página 24.

SACHDEV, S. **Quantum Phase Transitions**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2011. Citado na página 6.

ŠINDELKA, M.; SANTOS, L. F.; MOISEYEV, N. Excited-state quantum phase transitions studied from a non-Hermitian perspective. **Physical Review A**, APS, v. 95, n. 1, p. 010103, 2017. Citado na página 2.

VOJTA, M. Quantum phase transitions. **Reports on Progress in Physics**, IOP Publishing, v. 66, n. 12, p. 2069, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 1 e 5.

ANEXO A – Determinação iterativa do polinômio característico para o modelo Lipkin

A.1 A Matriz Tridiagonal Intercalada

A matriz tridiagonal intercaldada é uma denominação introduzida por esse trabalho, que tem como definição: se uma matriz $A = [a_{ij}]$ quadrada tiver elementos $a_{ij} = 0$ exceto quando $i = j$, $i = j + 2$ ou $i + 2 = j$, ela é uma matriz tridiagonal intercaldada (MTI).

$$A_n = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & a_{24} & 0 & \dots & 0 \\ a_{31} & 0 & a_{33} & 0 & a_{35} & \dots & 0 \\ 0 & a_{42} & 0 & a_{44} & 0 & a_{46} \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

A.1.1 O Determinante da matriz tridiagonal intercaldada

O intuito do estudo da matriz é escrever seu determinante e mostrar que é possível encontrar uma equação de recorrência para o determinante de uma MTI de dimensão $n \times n$ (det_n). Primeiro deve-se definir que

$$det_0 = 1 \quad (87)$$

e obviamente

$$det_1 = a_{11} \quad (88)$$

e

$$det_2 = a_{11}a_{22} = (det_1)a_{22} \quad (89)$$

A partir desses três determinantes definidos, pode-se de forma menos óbvia deduzir os determinantes das MTI com tamanhos maiores.

Para 3×3 ,

$$det_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} \\ 0 & a_{22} & 0 \\ a_{31} & 0 & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} - a_{13}a_{22}a_{31} = (det_2)a_{33} - a_{13}a_{31}[(det_0)a_{22} - 0] \quad (90)$$

Para demonstrar det_4, det_5, det_6 e det_7 , é utilizada a definição do teorema de Laplace.

$$det_4 = \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & a_{24} \\ a_{31} & 0 & a_{33} & 0 \\ 0 & a_{42} & 0 & a_{44} \end{vmatrix} = det_3 a_{44} - a_{24} a_{42} (a_{11} a_{33} - a_{13} a_{31})$$

$$det_4 = (det_3) a_{44} - a_{24} a_{42} [(det_1) a_{33} - a_{13} a_{31} (det_0)] \quad (91)$$

Para A_5 ,

$$det_5 = \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & a_{24} & 0 \\ a_{31} & 0 & a_{33} & 0 & a_{35} \\ 0 & a_{42} & 0 & a_{44} & 0 \\ 0 & 0 & a_{53} & 0 & a_{55} \end{vmatrix} = (det_4) a_{55} - a_{35} a_{53} \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & a_{24} \\ 0 & a_{42} & 0 & a_{44} \\ 0 & 0 & a_{55} & 0 \end{vmatrix}$$

$$det_5 = (det_4) a_{55} - a_{35} a_{53} [(det_2) a_{44} - a_{24} a_{42} (det_1)] \quad (92)$$

Para A_6 ,

$$det_6 = \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & a_{24} & 0 & 0 \\ a_{31} & 0 & a_{33} & 0 & a_{35} & 0 \\ 0 & a_{42} & 0 & a_{44} & 0 & a_{46} \\ 0 & 0 & a_{53} & 0 & a_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{64} & 0 & a_{66} \end{vmatrix}$$

$$det_6 = (det_5) a_{66} + a_{46} \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & a_{24} & 0 \\ a_{31} & 0 & a_{33} & 0 & a_{35} \\ 0 & 0 & a_{53} & 0 & a_{55} \\ 0 & 0 & 0 & a_{64} & 0 \end{vmatrix}$$

$$det_6 = (det_5) a_{66} + a_{46} [-a_{64} \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 \\ a_{31} & 0 & a_{33} & a_{35} \\ 0 & 0 & a_{53} & a_{55} \end{vmatrix} + a_{24} \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & a_{13} & 0 \\ a_{31} & 0 & a_{33} & a_{35} \\ 0 & 0 & a_{53} & a_{55} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}]$$

$$det_6 = (det_5) a_{66} - a_{46} a_{64} [(det_3) a_{55} - a_{35} \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{53} \end{vmatrix}]$$

então,

$$det_6 = (det_5) a_{66} - a_{46} a_{64} [(det_3) a_{55} - a_{35} a_{53} (det_2)] \quad (93)$$

Analisando as equações 87, 88, 89, 90, 91, 92 e 93, obtém-se a equação de recorrência para determinante da matriz A_n .

$$\det_n = (\det_{(n-1)})a_{nn} - a_{(n-2)n}a_{n(n-2)}[(\det_{(n-3)})a_{(n-1)(n-1)} - a_{(n-3)(n-1)}a_{(n-1)(n-3)}(\det_{(n-4)})]$$

(94)