

# Estudo do modelo XY por Monte Carlo

Marcelo de Oliveira Silva Guimarães

Orientador: Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa

Tese apresentada à Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Física.

Junho de 2014

# *1 Agradecimentos*

Agradeço a todos que contribuíram para realização desse trabalho e para minha formação como físico e como pessoa.

Ao professor Bismarck pela orientação.

Ao professor Aduino pela ajuda com o programa.

À minha mãe Isabel e meu pai Rogério pelo amor e apoio que me deram.

Ao meu irmão Rodrigo, minha família, e meus amigos por sempre acreditarem em mim.

À Bella pelo amor e carinho.

E ao meu cachorro Tarrask pela companhia.

À CNPQ e CAPES pelo apoio financeiro, e FAPEMIG pelo suporte do Laboratório de Simulação.

# *Resumo*

Transições de fase quânticas em sistemas de spins oferecem perspectivas no entendimento do comportamento crítico da matéria em baixíssimas temperaturas. Nesta tese, aplicamos métodos de Monte Carlo Quântico, usando expansões em série estocástica, para estudar as propriedades críticas de conjuntos de spins ligados antiferromagneticamente para estudar transições de fase mediadas por um termo de anisotropia. Simulamos o modelo XY tridimensional com anisotropia de plano fácil  $D$ , para spins  $S = 1, 3/2$  e  $2$  em redes cúbicas periódicas ( $L \times L \times L$ ) para  $L \in [4, 24]$ . A transição de fase quântica é caracterizada pela mudança do estado fundamental devido à alteração desse parâmetro. No caso de spins semi-inteiros, o aumento do termo anisotrópico restringe o espaço acessível de cada spin para o subespaço  $S = 1/2$ , o que apenas adiciona uma constante trivial na energia do sistema, portanto não espera-se que haja mudança do estado fundamental. Para spins inteiros temos um cenário diferente. Para  $D$  pequeno o sistema se encontra em uma fase gapless. Para  $D$  pequeno e alta temperatura o ordenamento magnético é destruído pelas flutuações térmicas. Para  $D$  grande e  $T = 0$  o sistema se encontra em um estado fundamental único restrito pela magnetização total  $M = \sum S_z = 0$ . O primeiro estado excitado é encontrado no setor de magnetização  $\sum S_z = 1$  definindo um gap de energia. Determinamos o ponto crítico quântico correspondente a essa transição com precisão, o que coincide com resultados analíticos obtidos por Pires e Costa[1]. As propriedades de escala do comprimento de correlação dinâmico foram calculadas. O expoente dinâmico crítico  $z$  ( que governa a relação entre o comprimento de correlação espacial e temporal), foi obtido utilizando um ansatz para o comportamento da susceptibilidade magnética em baixa temperatura. Foi possível estimar o gap na fase  $D$  grande e obter o expoente crítico  $z\nu = 0.59(1)$ . Usando escala de tamanho finito, obtivemos para o modelo o diagrama de fase o expoente crítico  $\nu = 0.501(5)$ , o ponto crítico  $D_c = 9.7948(3)J$  para spin 1 e  $\nu = 0.498(2)$ ,  $D_c = 29.923(5)J$  para spin 2. Não foi observada transição de fase quântica para  $S = 3/2$  como esperado. O expoente crítico  $\nu$  foi obtido por uma relação similar à Ref[2] e usando um procedimento criterioso desenvolvido nesta tese.

# *Abstract*

Phase transitions in spins systems offers perspectives in understanding low temperature critical behavior of matter. In this work we applied the Stochastic Series Expansion method to study the critical properties of antiferromagnetic coupled spins during a quantum phase transition mediated by an anisotropy term. We simulated the tridimensional XY model with easy plane anisotropy  $D$ , for spins  $S = 1, 3/2$  and  $2$  in cubic lattices ( $L \times L \times L$ ) with periodic boundary conditions for  $L \in [4, 24]$ . The quantum phase transition is characterized by the change of the ground state of the system due to an increase in that parameter. For semi-integer spins, the increase in this anisotropic term restrict the accessible spin space of each spin to that of  $S = 1/2$ , which only adds a trivial constant to the system energy, therefore no change in the ground state is expected. For integer spins we have a different case. For small  $D$  the system is found to be in a gapless phase. For small  $D$  and high temperature the magnetic ordering is destroyed by thermal fluctuations. For large  $D$  and  $T = 0$  the system has a unique ground state with  $Sz_{total} = 0$ , and its first excited state is found in the magnetization sector  $Sz_{total} = 1$  defined by an energy gap. The quantum critical point is determined precisely in this work, which coincide with the analytical results obtained by Pires e Costa[1]. The dynamic correlation length critical properties were calculated. The dynamical critical exponent  $z$  ( which governs the relation between the espacial and temporal correlation length), was obtained using an ansatz to the low temperature magnetic susceptibility behavior. The high  $D$  gap was estimated and the critical exponent  $z\nu = 0.59(1)$  was found.

Using finite size scaling, we constructed the phase diagram of the model and obtained the critical exponent  $z\nu = 0.501(5)$ , the critical point  $D_c = 9.7948(3)J$  for spin 1 and  $z\nu = 0.498(2)$ ,  $D_c = 29.923(5)J$  for spin 2. No quantum phase transition was observed for  $S = 3/2$  as expected. The critical exponent  $\nu$  was obtained by a similar relation used in Ref[2] and using a judicious procedure developed by me.

# *Sumário*

Resumo	p. iii
Abstract	p. iv
Lista de Figuras	p. viii
Preâmbulo	p. 1
1 Introdução	p. 2
2 Transições de fase	p. 9
2.1 Conceitos básicos de transições de fase . . . . .	p. 9
2.2 Transições de fase quânticas . . . . .	p. 14
2.2.1 Exemplo: Ising com campo transversal . . . . .	p. 17
2.2.2 Tempo e o expoente crítico dinâmico . . . . .	p. 20
2.2.3 Escala próximo do ponto crítico em $T = 0$ . . . . .	p. 21
2.2.4 Extensão à temperatura finita . . . . .	p. 22
3 Monte Carlo Quântico	p. 23
3.1 Introdução . . . . .	p. 23
3.1.1 Implementações realizadas . . . . .	p. 24
3.2 ALPS . . . . .	p. 24
3.3 Detalhes do método SSE . . . . .	p. 25
3.3.1 Algoritmo SSE para Sistemas Clássicos . . . . .	p. 25
3.3.2 Algoritmo SSE para Sistemas Quânticos . . . . .	p. 29

3.4	Estados propagados . . . . .	p. 33
3.4.1	Representação de estados propagados . . . . .	p. 34
3.4.2	Representação de vértices encadeados . . . . .	p. 37
3.5	Balanço detalhado . . . . .	p. 39
3.5.1	Alteração diagonal . . . . .	p. 40
3.5.2	Alteração pelo operador de laço (Operator Loop Update) . . . . .	p. 41
3.6	Soluções para equações de laço dirigido . . . . .	p. 47
3.6.1	Banho térmico . . . . .	p. 47
3.6.2	Balanço Detalhado do laço dirigido . . . . .	p. 50
3.6.3	Equações de laço dirigidas . . . . .	p. 53
3.6.4	Quicagem Mínima . . . . .	p. 55
3.6.5	Solução ótima local . . . . .	p. 56
3.7	Cálculo de quantidades físicas usando o método SSE . . . . .	p. 56
3.7.1	Calor Específico . . . . .	p. 57
3.7.2	Susceptibilidade Estática de spin . . . . .	p. 57
3.7.3	Rigidez de spin (Spin stiffness) . . . . .	p. 59
3.7.4	Escala de tamanho finito para rigidez de spin . . . . .	p. 61
4	Modelo XY anisotrópico em três dimensões . . . . .	p. 63
4.1	Diagrama de fase $S = 1$ . . . . .	p. 64
4.2	Construção do Diagrama de fase . . . . .	p. 65
4.2.1	Anisotropia $D$ pequena . . . . .	p. 65
4.3	Anisotropia e expoentes críticos . . . . .	p. 67
4.3.1	Anisotropia crítica $D_c$ . . . . .	p. 67
4.3.2	Expoente dinâmico crítico . . . . .	p. 68
4.3.3	Escala com razão de aspecto constante . . . . .	p. 71
4.3.4	Correções de escala . . . . .	p. 73

4.3.5	Anisotropia crítica $D_c$ em função de $\alpha$ . . . . .	p. 79
4.3.6	Anisotropia $D$ grande, comportamento do <i>gap</i> . . . . .	p. 80
4.4	Diagrama de fase para Spin $S = \frac{3}{2}$ e $2$ . . . . .	p. 84
5	Conclusão	p. 90
5.1	Perspectivas . . . . .	p. 91
Apêndice A – Mapeamento Ising campo transversal para Ising clássico bidimensional		p. 92
Apêndice B – Correções de escala para susceptibilidade uniforme		p. 97
Referências Bibliográficas		p. 99

# *Lista de Figuras*

- 1.1 Esboço do diagram de fase  $T_c(D)$  para uma transição de fase quântica em função da anisotropia  $D$ . O ponto critico quântico  $T_c(D_c) = 0$  separa a fase ordenada, (gapless), da fase desordenada (com gap de excitação ). p. 3
- 1.2 Esquema representando as interações entre spins.  $J_1$  é a interação entre spins em um mesmo plano e  $J_2$  é a interação entre spins de planos adjacentes. Ambas as interações são entre sítios próximos. . . . . p. 4
- 1.3 Gap de excitação elementar  $\frac{\Delta}{D}$  em  $T = 0$  ao aumentar o parâmetro  $\frac{J}{D}$ . A variação do parâmetro de ordem de superfluidez  $\Delta_s$  também é mostrado. Figura retirada da Ref [3] (os nomes das interações foram alterados para conformidade com o hamiltoniano 1.1. . . . . p. 5
- 1.4 Temperatura crítica  $T_c$  em função do parâmetro de anisotropia  $D$ , para  $D \leq D_c$ . Figura retirada da Ref [1]. . . . . p. 6
- 1.5 Temperatura crítica  $T_c$  em função do parâmetro  $\alpha$ , para  $0 \leq \alpha \leq 1$ . Figura retirada da Ref [1]. . . . . p. 7
- 1.6  $z$  é o número de ligações de um sítio da rede. (a) Resultado do modelo tridimensional de Wang e Wang [4]. Temperatura crítica  $T_c$  em função do parâmetro de anisotropia  $D$ , para  $D \leq D_c$  com  $R = 0$  (quadrados), 0.5(círculos), 1 (triângulos), 1.5 (diamantes), 2.0 (hexagonos). (b) Resultado de Wang e Wong [5]. Magnetização staggered em função da razão entre parâmetro de anisotropia e energia de troca  $\frac{D}{J}$ , para  $D \leq D_c$  com  $R = 0$  para várias estruturas de redes. . . . . p. 7
- 2.1 Perto da temperatura críticas o comprimento de correlação  $\xi$  é muito grande de forma que os sítios dentro da área tracejada devem estar fortemente correlacionados. . . . . p. 12
- 2.2 Esquema do diagrama de fase de uma transição quântica . . . . . p. 17



2.3	Ponto não analítico na energia do estado fundamental em função de um parâmetro não-térmico $g$ . . . . .	p. 19
3.1	Protótipo do Algoritmo SSE clássico para $P$ passos de Monte Carlo realizando $M$ medidas por passo. . . . .	p. 27
3.2	Rede bidimensional quadrada com $L_x = L_y = 4$ , representando as ligações do hamiltoniano. . . . .	p. 29
3.3	Os seis vértices possíveis para o modelo xxz de spin 1/2 . . . . .	p. 35
3.4	Representação de estados propagados na representação de vértices encadeados . . . . .	p. 37
3.5	representação de vértices encadeados para a configuração SSE da Fig 3.4	p. 38
3.6	Os seis vértices com suas pernas de vértices correspondentes . . . . .	p. 38
3.7	Todos os quatro caminhos possíveis aplicados nos vértices dos tipos 1 e 5.	p. 42
3.8	Duas maneiras de fechar um operador de laço . . . . .	p. 44
3.9	Configuração SSE na representação de estados propagados antes e depois de uma operação de laço. . . . .	p. 45
3.10	Vértices permitidos e alterados em um algoritmo determinístico de operador-laço no caso do modelo de Heisenberg antiferromagnético. . . . .	p. 49
3.11	Exemplo de um vértice onde a perna de entrada é a perna esquerda inferior. O números dentro do círculo indicam o estado do spin . . . . .	p. 53
3.12	Os vértices resultantes da seleção de pernas de saída diferentes mostradas na figura 3.11 . . . . .	p. 54
3.13	Os vértices produzidos por pernas de saídas diferentes na Fig 3.12 . . . . .	p. 54
3.14	Dois modos diferentes de chegar ao vértice 3 na Fig. 3.12. . . . .	p. 55
4.1	(a) Diagrama de fase: dos resultados da simulação, de Pires e Costa e de Wang e Wang . . . . .	p. 64
4.2	(a) Curvas de $L\rho_s$ como função da temperatura inversa $\beta = \frac{1}{T}$ . (b) Melhor colapso de curva da rigidez de spin ( $\rho_s L$ por $tL^{\frac{1}{\nu}}$ ) com $\nu = 0.66(2)$ , $T_c = 2.93$ , $D = 0$ e $t = \frac{T}{T_c} - 1$ . . . . .	p. 66

- 4.3 (a) Curvas de  $L\rho_s$  como função da temperatura inversa  $\beta = \frac{1}{T}$ . (b) Melhor colapso de curva da rigidez de spin( $\rho_s L$  por  $tL^{\frac{1}{\nu}}$ ) com  $\nu = 0.66(2)$ ,  $T_c = 3.04$ ,  $D = 1$  e  $t = \frac{T}{T_c} - 1$  . . . . . p. 66
- 4.4 (a) Curvas de  $L\rho_s$  como função da temperatura inversa  $\beta = \frac{1}{T}$ . (b) Melhor colapso de curva da rigidez de spin( $\rho_s L$  por  $tL^{\frac{1}{\nu}}$ ) com  $\nu = 0.66(2)$ ,  $T_c = 2.39$ ,  $D = 8$  e  $t = \frac{T}{T_c} - 1$  . . . . . p. 67
- 4.5 Curvas de  $L\rho_s$  como função da anisotropia  $D$  (a)  $T = 0.250$  (b)  $T = 0.125$ . p. 69
- 4.6 Gráfico em escala logarítmica do colapso da curva de  $\rho L \times TL^z$  de acordo com a eq. 4.6. O melhor colapso para as curvas foi obtido para (a)  $\alpha = 1.0$ ,  $D_c = 9.8$ ,  $z = 0.76(12)$ , (b)  $\alpha = 0.5$ ,  $D_c = 8.0$ ,  $z = 0.70(3)$ . . . . . p. 70
- 4.7 Gráfico em escala logarítmica do colapso da curva de susceptibilidade ( $\chi$ ) assumindo  $z = 1$ , (a) para  $\alpha = 1.0$  e  $D_c = 9.8$ , (b) para  $\alpha = 0.5$  e  $D_c = 8.0$ . p. 70
- 4.8 Colapso de curvas de acordo com a Eq. (4.4) com  $D_c = 9.78$  e  $T = 0.250$ . Melhores colapsos encontrados (a)  $\nu = 0.60$  e (b)  $\nu = 0.71$ . . . . . p. 71
- 4.9 Colapso de curvas de acordo com a Eq. (4.4) com  $D_c = 9.78$  e  $T = 0.125$ . Melhores colapsos encontrados (a)  $\nu = 0.52$  e (b)  $\nu = 0.63$ . . . . . p. 71
- 4.10 Curvas de  $L^2\rho_s$  como função da anisotropia  $D$ .  $R = TL$  ( $z = 1$ ) (a)  $R=2$  (b)  $R=1$ . . . . . p. 73
- 4.11 Colapso da rigidez de spin de acordo com a hipótese de escala da Eq. (4.8) com  $TL = 2$  para  $\alpha = 1.0$ . Colapsos razoáveis podem ser vistos para um intervalo razoável de  $\nu$  com  $D_c = 9.795$ , (a)  $\nu = 0.6$  e (b)  $\nu = 0.5$ . . . . . p. 74
- 4.12 Curvas  $\rho_s(L, g)L^2$  por  $g$  e respectivas regressões lineares  $Y = A + Bx$  para (a)  $L = 8$  e  $A = 15.571$  e (b)  $L = 16$  e  $A = 33.314$ . . . . . p. 75
- 4.13 (a) Curvas normalizadas  $\frac{\rho_s(L, g)L^{d+z-2}}{A(L)}$  para  $L = 8$  representado por quadrados e para  $L = 16$  representado por asteriscos. (b) Os valores e incertezas de  $\nu$  e  $D_c$  dependem do polinômio de ordem  $n$  que melhor se ajuste aos dados. Em (b) os polinômios são ajustando no intervalo  $g \in [-0.15, 0.15]$ . O de ordem  $n = 1$  é representado pela linha pontilhada,  $n = 2$  pela linha sólida e  $n = 3$  pela linha tracejada. . . . . p. 76
- 4.14 O colapso da curva da rigidez de spin foi obtido para diversos tamanhos de redes utilizando os valores  $\nu = 0.501(5)$  e  $D_c = 9.7948(3)$  os quais produziram o menor erro de  $\nu$  quando avaliado pela Eq. (4.20). . . . . p. 77

- 4.15 Comportamento da anisotropia em função do parâmetro  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ . . . . . p. 79
- 4.16 Cálculo do expoente  $n$  da Eq. (4.21) usando a derivada do logaritmo da susceptibilidade para rede de tamanho  $L = 4$  (círculos);  $n = -1.02 \pm 0.08$  e  $L = 6$  (quadrados)  $n = -1.0 \pm 0.1$  para anisotropia  $D = 10.1$ . . . . . p. 81
- 4.17 (a) Gap de tamanho finito obtido para vários tamanhos de rede pelo termo independente da regressão linear do gráfico  $T \ln(T\chi_\infty) \times T$  avaliado na anisotropia  $D = 10.0$ . (b) *Gap* no limite termodinâmico  $\Delta(\infty)$  extrapolado pelos *gaps* de tamanho finito  $\Delta(L)$  para  $D > D_c$  (legenda) de acordo com a Eq. (4.26). . . . . p. 82
- 4.18 Gráfico logaritmo do gap de tamanho finito  $\ln(\Delta(L))$  em função do logaritmo da anisotropia relativa ( $\ln(D - D_c)$ ) para  $\alpha = 1.0$ . A inclinação da curva fornece  $z\nu$  em função do tamanho finito dado por  $z\nu = 0.24, 0.41, 0.48, 0.54$  para as respectivas redes simuladas 4, 6, 8, 10 (legenda). O gap extrapolado para rede de tamanho infinito ( $\infty$ )  $z\nu = 0.59$  é representado no gráfico pelo asterisco. . . . . p. 82
- 4.19 As figuras (a) e (b) ilustram um gráfico logaritmo do gap  $\ln(\Delta)$  em função do logaritmo da anisotropia relativa ( $\ln(D - D_c)$ ) para  $\alpha = 1.0$  e  $0.5$  respectivamente. (a) Duas estimativas de  $\nu$  dada pelas inclinações da regressão linear, uma dos círculos e outra dos quadrados, que foram usadas para estimar o valor médio e o erro  $z\nu = 0.59(1)$  para  $\alpha = 1.0$  e  $D_c = 9.795$ . (b) O valor e incerteza para  $\alpha = 0.5$  com  $D_c = 8.03$  é dado pelo resultado da inclinação da regressão linear na qual  $z\nu = 0.62(3)$ . . . . . p. 83
- 4.20 Diagrama de fase para spin  $S = 1$  (círculos),  $S = \frac{3}{2}$  (quadrados) e  $S = 2$  (asteriscos). Na figura pode ser observada a anisotropia crítica  $\frac{D_c}{S(S+1)J} = 4.8975(5)$  para  $S = 1$ ,  $\frac{D_c}{S(S+1)J} = 4.9868(7)$  para  $S = 2$ . Não foi observado transição de fase quântica para  $S = \frac{3}{2}$  ao variar a anisotropia  $D$ . . . . . p. 84
- 4.21 Estimativa de  $D_c$  obtida pelo cruzamento das curvas de rigidez de spin das maiores redes (14, 16) para  $S = 2$ . O erro é dado pela diferença entre os valores obtidos do cruzamento das maiores (16, 14) e menores (4, 6) redes. Na Eq. (4.8) novamente assumimos  $z = 1$ ,  $R = TL$  obtendo a)  $D_c = 29.9229(31)$  para  $TL = 2$  b)  $D_c = 29.9227(33)$  para  $TL = 4$ . . . . . p. 85
- 4.22 Colapso das curvas de rigidez de spin para  $D_c = 29.923$  conforme Eq. (4.8) para (a)  $z\nu = 0.497$ ,  $TL = 2$  e (b)  $z\nu = 0.499$ ,  $TL = 4$ . . . . . p. 85
- 4.23 Superposição das duas curvas da Fig. 4.22 representadas por círculos e cruces para respectivas razões de aspecto  $TL = 2$  e  $TL = 4$ . . . . . p. 86

- 4.24 Determinação de  $D_c$  pelo menor desvio de  $\langle \nu(\epsilon, L, L') \rangle_{L, L', \epsilon}$  conforme Eq. (4.29). Os círculos e quadrados são resultados obtidos utilizando um conjunto de dados para  $TL = 4$  e  $TL = 2$ , respectivamente. O desvio está em escala logarítmica. Os símbolos listrados são subconjuntos disjuntos dos dados que deram origem aos símbolos sólidos. . . . . p. 87
- 4.25 Colapso das curvas de rigidez de spin para redes de tamanho  $L \in [8, 16]$ . Melhor ajuste com (a)  $D_c = 29.914(8)$ ,  $z\nu = 0.4901(50)(88)$  para  $TL = 4$  e (b)  $D_c = 29.919(3)$ ,  $z\nu = 0.4907(70)(94)$  para  $TL = 2$ . O primeiro erro se deve ao desvio em  $\langle \epsilon \rangle$ , enquanto o segundo se deve ao desvio em  $\langle L, L' \rangle$ . . . . . p. 88
- 4.26 Fig (a)  $gap(L = \infty)$  para  $D > D_c$  obtido conforme Eq. (4.26). Fig (b) Gráfico log-log do  $gap(L = \infty)$  em função de  $g = D - D_c$  para  $\alpha = 1.0$ . A inclinação das curvas fornece  $z\nu = 0.628(2)$  com  $D_c = 29.92$ . . . . . p. 89

# Preâmbulo

Uma transição de fase ocorre quando alguma propriedade termodinâmica de um material mostra uma singularidade como função de algum parâmetro termodinâmico. Um exemplo bem conhecido de transição de fase é aquela entre um estado ferromagnético ordenado à baixa temperatura para um estado paramagnético à alta temperatura. Transições de fase também ocorrem em processos de crescimento e em reações químicas. Além de sua importância em processos físicos, tais transições representam um desafio, tanto sob o ponto de vista teórico quanto experimental e simulacional. Os exemplos de transição mencionados acima ocorrem a temperatura finita. Nessas transições térmicas, ditas clássicas, as flutuações quânticas podem ser desprezadas e a ordem magnética é destruída por flutuações térmicas. No presente trabalho estamos interessados em transições que ocorrem à temperatura zero quando um parâmetro não térmico como pressão ou campo magnético se altera, e as flutuações que destroem a fase ordenada são de origem quântica.

# 1 Introdução

Transições de Fase Quânticas (TFQ) são fenômenos interessantes devido a comportamentos físicos não-convencionais próximos do ponto crítico [6, 7]. Diferentemente das transições convencionais induzidas por um ajuste na temperatura  $T$ , as transições quânticas ocorrem em  $T = 0$ , e correspondem à uma mudança na simetria do estado fundamental do sistema como resposta à variação de algum parâmetro do modelo. Em particular, modelos de spin na rede representam sistemas com comportamento muito rico. Em tais sistemas as flutuações quânticas reduzem a ordem magnética do estado fundamental. Estas flutuações podem, por exemplo, ser controladas por um parâmetro de anisotropia  $D$ . Acima de uma anisotropia crítica,  $D_c$ , o estado fundamental é desordenado. Uma mudança brusca do estado fundamental caracteriza a transição de fase quântica.

Em particular, o modelo  $XY$  com anisotropia,  $D$ , de íon único, é um modelo bastante estudado [1, 5, 8, 9, 4]. Seu comportamento crítico, como função da temperatura e anisotropia pode ser resumido da seguinte maneira: para  $D < D_c$ , o sistema é ordenado na região  $T < T_c$ . Flutuações térmicas destroem a ordem acima de uma temperatura crítica  $T_c(D)$ . Para  $D$  grande, o sistema é desordenado mesmo em  $T = 0$  e a energia do estado fundamental é separado do primeiro estado excitado por um *gap*. A figura 1.1 mostra qualitativamente este comportamento. Entre materiais antiferromagnéticos existe uma família de materiais em que essa anisotropia ultrapassa o valor da energia de troca. Estes são chamados de antiferromagnetos de Van Vleck. O composto  $NiCl_2SC(NH_2)_2$  [10] descrito pelo hamiltoniano  $\mathcal{H} = J \sum_{(i,m)} (S_i^x S_m^x + S_i^y S_m^y) + \sum_i D (S_i^z)^2$  é um protótipo para o modelo no regime  $D$  grande. Estes são os modelos nos quais estaremos interessados nesta tese.

O modelo citado já foi estudado analiticamente em 1, 2 e 3 dimensões por diversos métodos. Tais análises requerem aproximações que são aceitáveis em um regime restrito do diagrama de fase  $T_c(D)$ . Em todas as aproximações, flutuações do parâmetro de ordem são desprezadas ou renormalizadas em menor ou maior grau. Embora o comportamento qualitativo possa ser preservado dentro das aproximações, a descrição quantitativa pode

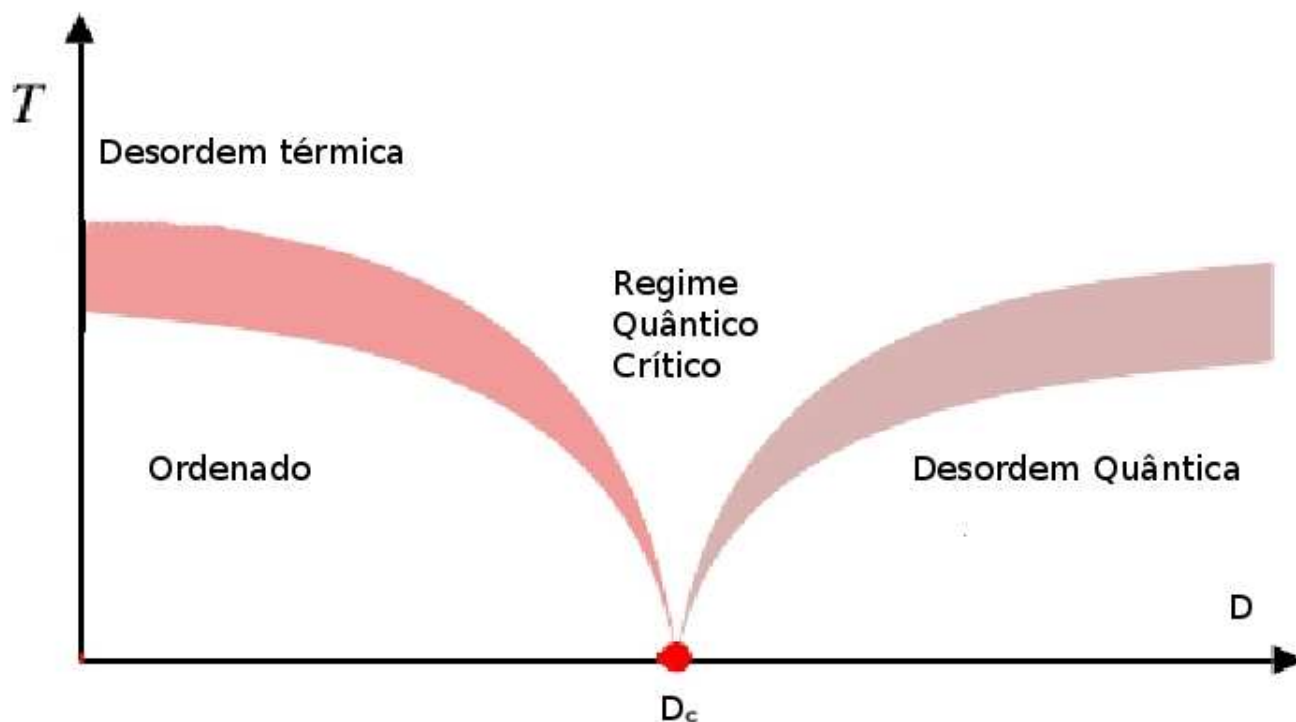


Figura 1.1: Esboço do diagram de fase  $T_c(D)$  para uma transição de fase quântica em função da anisotropia  $D$ . O ponto crítico quântico  $T_c(D_c) = 0$  separa a fase ordenada, (gapless), da fase desordenada (com gap de excitação).

depender significativamente dessas flutuações, por esta razão, métodos de análise numérica se mostram poderosos na discussão da validade destas aproximações, uma vez que está livre de simplificações do modelo.

Monte Carlo Quântico (MCQ) é um método numérico poderoso[11]. Quando combinado com técnicas de análise de tamanho finito[11] pode fornecer propriedades do modelo tanto do estado fundamental, quanto para  $T > 0$ . Essas técnicas são mais facilmente aplicadas para sistemas de baixa dimensão  $d$ , uma vez que permitem acesso a sistemas com grandes volumes, essencial para a análise do limite termodinâmico. Um modelo quântico de dimensão  $d$  comporta-se como se tivesse dimensão  $d + 1$  próximo de um ponto crítico quântico[7]. Em  $d = 3 + 1$  espera-se que os expoentes críticos sejam dados pela teoria de campo médio. Considerando  $L$  a dimensão linear do sistema e  $\beta$  a temperatura inversa, o esforço computacional é proporcional a  $\beta L^d$ . Desta forma, muitas simulações sofrem uma séria limitação a valores de  $L$  pequeno para temperaturas baixas, dificultando a obtenção de parâmetros críticos.

O Hamiltoniano do sistema de interesse neste trabalho é dado por:

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,m \rangle_1} (\hat{S}_i^x \hat{S}_m^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_m^y) + J_2 \sum_{\langle i,m \rangle_2} (\hat{S}_i^x \hat{S}_m^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_m^y) + \sum_i D(\hat{S}_i^z)^2, \quad (1.1)$$

no qual  $\hat{S}_i^x, \hat{S}_i^y, \hat{S}_i^z$  são os operadores de spin. O modelo é definido em uma rede cúbica. Os índices  $i, m$  enumeram os sítios da rede.  $D > 0$  é uma anisotropia e  $J_1, J_2 > 0$  são interações antiferromagnéticas. A soma em  $\langle i, m \rangle_1$  é feita entre primeiros vizinhos para sítios em um mesmo plano e está relacionada à interação  $J_1$ . A soma em  $\langle i, m \rangle_2$  é feita entre primeiros vizinhos para sítios entre planos adjacentes e está relacionada à interação  $J_2$  como esquematizado na figura 1.2. Definimos o parâmetro  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ , a razão das interações. Para  $\alpha = 0$  temos uma coleção de planos independentes.

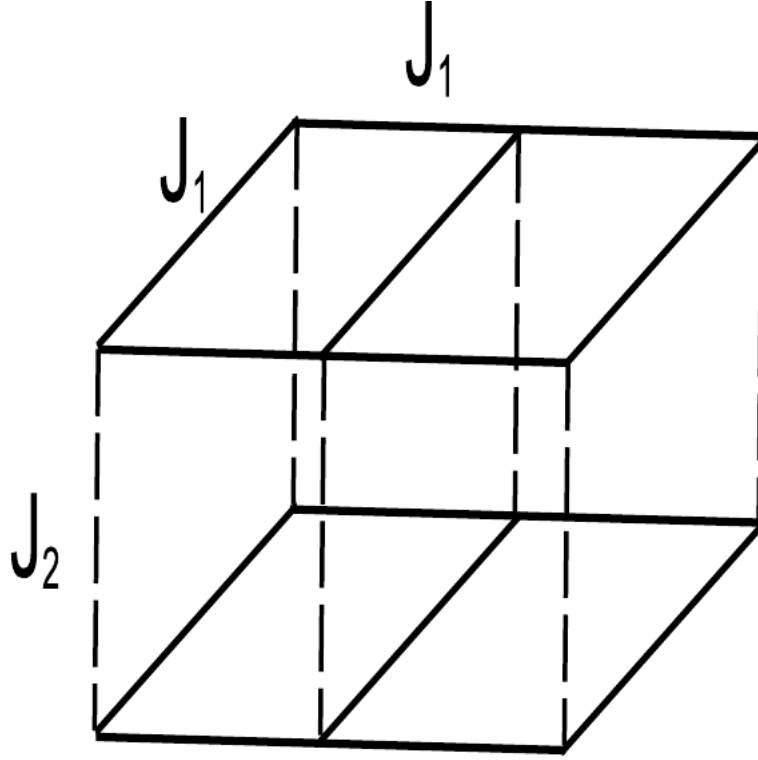


Figura 1.2: Esquema representando as interações entre spins.  $J_1$  é a interação entre spins em um mesmo plano e  $J_2$  é a interação entre spins de planos adjacentes. Ambas as interações são entre sítios próximos.

No caso de spin  $S = 1$ , esse modelo pode ser obtido a partir do modelo de Bose-Hubbard. Na referência [3] os autores consideraram um modelo de bósons na rede ótica com interações de caroço mole (*soft-core*) em uma região próxima da fase isolante de Mott, onde as flutuações são pequenas e apenas ocupações em torno do valor médio são relevantes. Este modelo tem uma transição de fase quântica da fase isolante de Mott para fase superfluida[3, 12]. Na figura 1.3 reproduzimos o resultado da referência [3] que mostra como o *gap* de energia se reduz continuamente para zero para  $\frac{D_c}{J} = \frac{1}{0.094} = 10.64$



para  $\alpha = 1$ . Os parâmetros do modelo foram renomeados para simplificar a comparação com a equação 1.1.

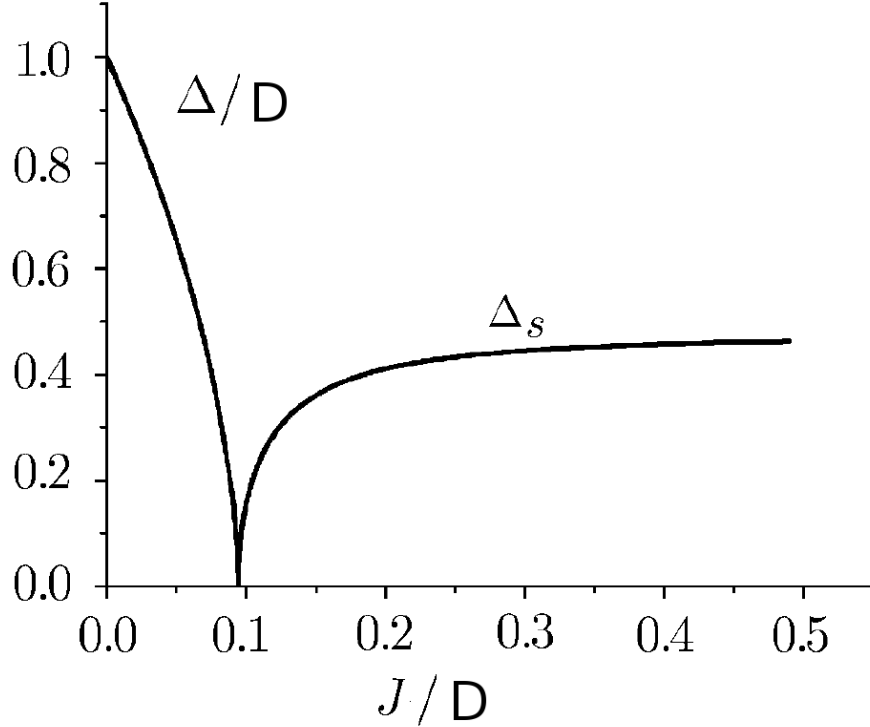


Figura 1.3: Gap de excitação elementar  $\frac{\Delta}{D}$  em  $T = 0$  ao aumentar o parâmetro  $\frac{J}{D}$ . A variação do parâmetro de ordem de superfluidez  $\Delta_s$  também é mostrado. Figura retirada da Ref [3] (os nomes das interações foram alterados para conformidade com o hamiltoniano 1.1).

Um tratamento de campo médio foi realizado pelos autores Pires e Costa[1] no Hamiltoniano 1.1. Eles usaram o método do operador de ligação (*bond-operator*) na região  $D$  grande obtendo  $D_c = 10.6$ . Também realizaram uma aproximação hamônica auto-consistente (*Self Consistent Harmonic Approximation*, SCHA) em toda região  $T_c \times D$  para obter o diagrama de fase do modelo e  $D_c = 9.77$ . Esse diagrama pode ser visto na figura 1.4. Utilizando o resultado do método de operador de ligação investigou-se o comportamento da anisotropia crítica  $D_c$  em função do parâmetro  $\alpha$ , como pode ser visto na figura 1.5. Foi observado um decaimento contínuo do gap como  $\Delta \propto (D - D_c)^B$ . Eles encontraram:  $B = 1$  para  $\alpha = 0$ ,  $B = 0.6$  para  $0 < \alpha < 1$ ,  $B = 0.5$  para  $\alpha = 1$ . Um resultado interessante é o aumento em  $T_C$  com  $D$  para  $D$  pequeno. Esse comportamento é mais acentuado ao utilizar outros métodos como observado por Wang e Wang [4] e Wang e Wong [5] e também pode ser visto no modelo de Heisenberg[4, 5, 9].

Wang e Wang [4] e Wang e Wong [5] estudaram esse modelo com adição de um

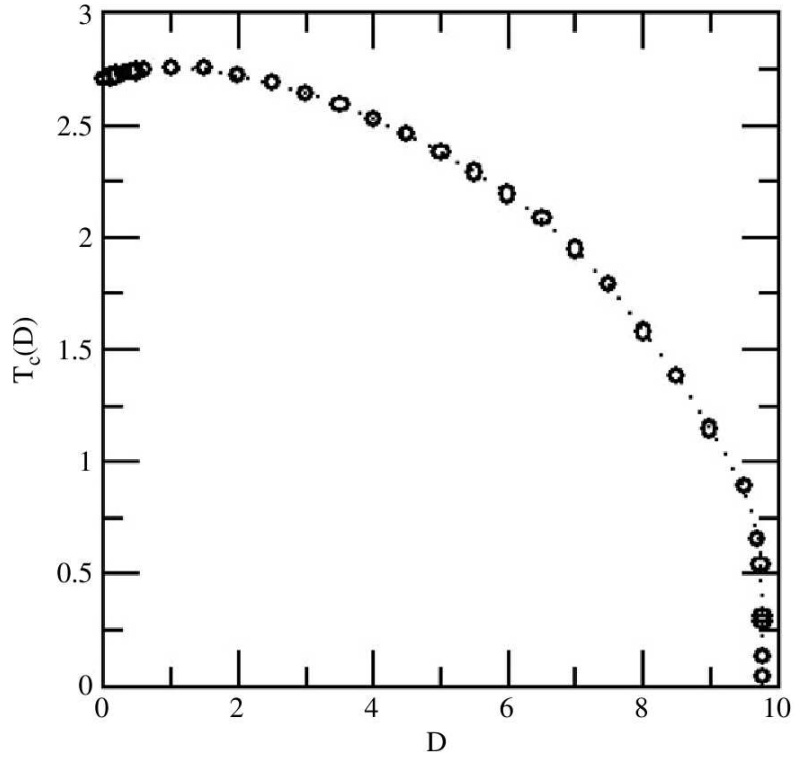


Figura 1.4: Temperatura crítica  $T_c$  em função do parâmetro de anisotropia  $D$ , para  $D \leq D_c$ . Figura retirada da Ref [1].

termo de troca  $R \sum \hat{S}_i^z \hat{S}_m^z$  e para  $\alpha = 1$ . O hamiltoniano 1.1 é recuperado para  $R = 0$ . O mesmo valor  $B = 0.5$  para o decaimento do gap foi encontrado em ambos os trabalhos. A anisotropia crítica foi encontrada  $D_c = 10.481J$ ,  $D_c = 10.8J$  por Wang e Wang [4] e Wang e Wong [5] respectivamente. Os resultados podem ser vistos na figura 1.6.

O objetivo desse trabalho é estudar o modelo tridimensional  $XY$  anisotrópico usando o método de Monte Carlo Quântico (MCQ) na representação de expansão em série estocástica (ESS) no esquema de laço dirigido (directed-loop) com atualizações localmente ótimas, para spin  $S = 1$ ,  $\alpha \in [0, 1]$ [13]. É dada ênfase ao estudo para  $\alpha = 1$ . O trabalho é estendido para spin  $S = 2; 3/2$ . Em cada caso é calculado o ponto crítico  $D_c$  e seu comportamento em função de  $\alpha; D_c(\alpha)$  para spin  $S = 1$  ou em função do spin  $S; D_c(S)$  para  $\alpha = 1$ . Também são obtidas estimativas para o expoente crítico  $\nu$ . Para obter boas estimativas do expoente crítico  $\nu$ , desenvolvemos uma técnica que nos permite obter as estimativas mais confiáveis. A estrutura dessa tese é como segue.

No capítulo 2 apresenta-se o fundo teórico sobre transições de fase clássicas e quânticas. As principais relações de escala são discutidas nessas seções. A transição de fase quântica no modelo Ising unidimensional com campo transversal é analisada como exemplo

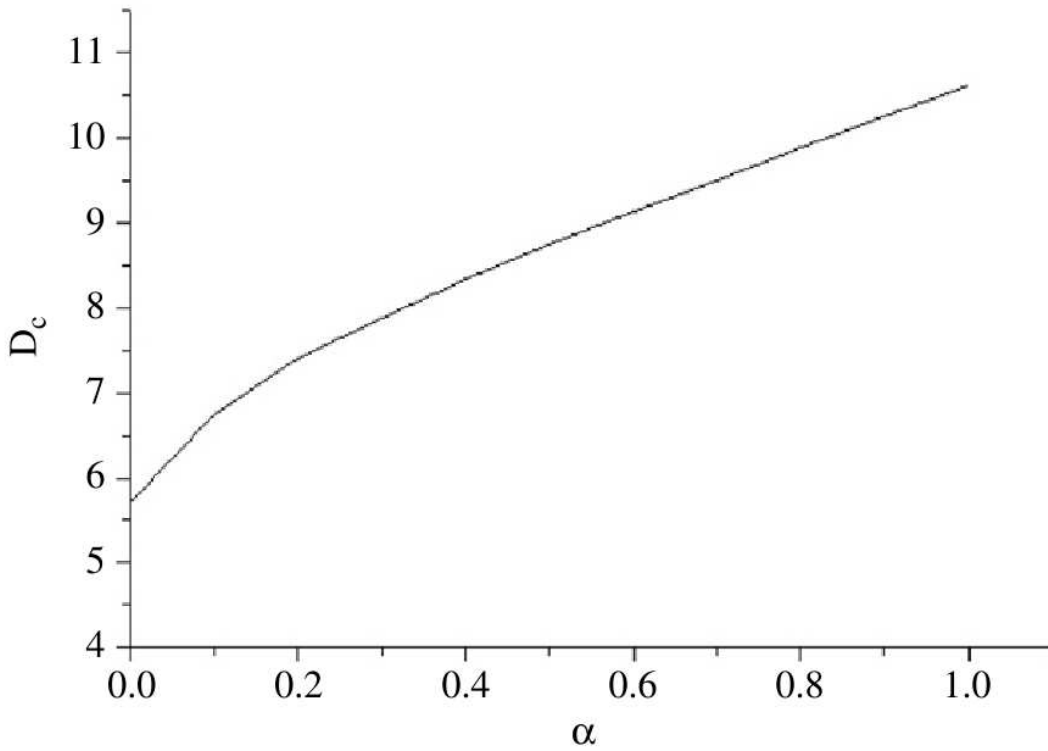


Figura 1.5: Temperatura crítica  $T_c$  em função do parâmetro  $\alpha$ , para  $0 \leq \alpha \leq 1$ . Figura retirada da Ref [1].

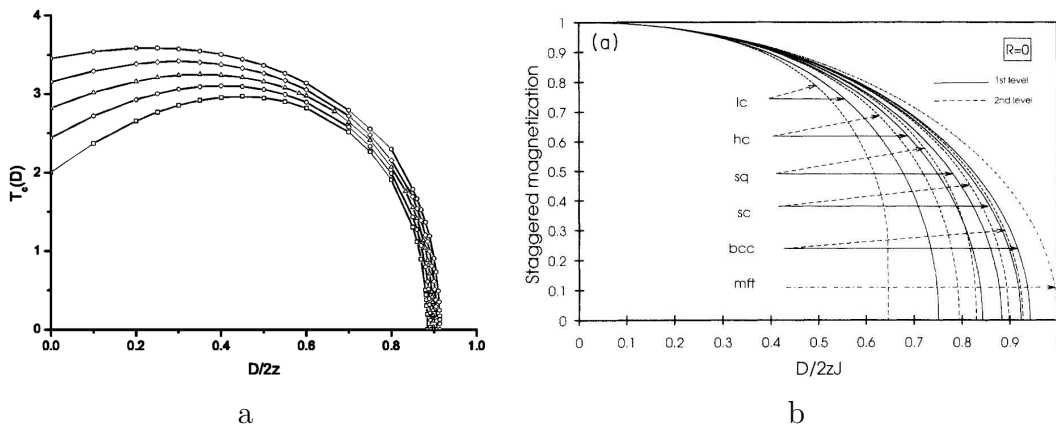


Figura 1.6:  $z$  é o número de ligações de um sítio da rede. (a) Resultado do modelo tridimensional de Wang e Wang [4]. Temperatura crítica  $T_c$  em função do parâmetro de anisotropia  $D$ , para  $D \leq D_c$  com  $R = 0$  (quadrados),  $0.5$  (círculos),  $1$  (triângulos),  $1.5$  (diamantes),  $2.0$  (hexagonos). (b) Resultado de Wang e Wong [5]. Magnetização staggered em função da razão entre parâmetro de anisotropia e energia de troca  $\frac{D}{J}$ , para  $D \leq D_c$  com  $R = 0$  para várias estruturas de redes.

didático. Um mapeamento desse modelo para um sistema bidimensional clássico equivalente é discutido no apêndice A.

---

No capítulo 3 descreve-se o método MCQ utilizado: Expansão em Séries Estocásticas (ESS). Uma explicação detalhada de seu formalismo clássico e quântico é fornecida. Focalizamos a discussão para descrever o método de laço dirigido (directed-loop update). Por fim é discutido como os principais observáveis são calculados nesse algoritmo. No apêndice *B* é possível encontrar detalhes de como esse algoritmo pode ser implementado.

No capítulo 4 são apresentados os principais resultados e discussões. Nele, podem ser vistos os diagramas de fase obtidos e suas comparações entre os resultados analíticos da literatura. O ponto crítico quântico é obtido precisamente e consistentemente de duas maneiras, tanto pelo cruzamento entre curvas da rigidez de spin para diversos tamanhos de rede, quanto pelo colapso das mesmas. São discutidas as dificuldades encontradas para uma estimativa precisa do expoente crítico  $\nu$  e o desenvolvimento de um método para contornar esse problema.

No capítulo 5 apresentamos conclusões assim como perspectivas sobre a extensão natural desse estudo.

## 2 *Transições de fase*

### 2.1 **Conceitos básicos de transições de fase**

Neste capítulo faremos uma breve descrição de conceitos básicos de transições de fase e comportamento crítico [14], necessários para discussões futuras.

Uma transição de fase pode ser definida como uma mudança abrupta nas propriedades termodinâmicas do sistema em resposta à variação contínua de algum parâmetro externo tais como: temperatura, pressão e etc [15]. Segundo a definição de Ehrenfest, as transições de fase podem ser classificadas pelo comportamento da energia livre em função de algum parâmetro termodinâmico [16], conforme o comportamento da derivada de menor ordem da energia livre que apresenta uma descontinuidade. Várias transições sólido-líquido-gás são classificadas como transições de primeira ordem porque envolvem uma mudança descontínua na densidade, a qual é a primeira derivada na energia livre em relação ao potencial químico. Transições de fase de segunda ordem seriam aquelas cuja primeira derivada da energia livre é contínua durante a transição, mas sua segunda derivada é descontínua. Essas incluem a transição de fase ferromagnética onde é observado uma descontinuidade na susceptibilidade magnética que é a derivada da energia livre em relação a um campo magnético externo aplicado. A magnetização é a primeira derivada da energia livre em relação ao campo sendo contínua durante a transição.

Essa classificação se torna inadequada quando alguma derivada da energia livre diverge. Um exemplo poder ser visto na transição ferromagnética onde a capacidade térmica diverge no limite termodinâmico. Uma definição mais apropriada se deve a Fisher [17], que define como de primeira-ordem as transições onde há descontinuidade na primeira derivada da energia livre do sistema Fisher também define as transições contínuas, que apresentam a primeira derivada contínua e observa-se uma descontinuidade ou divergência da segunda derivada.

Durante a transição espera-se que algum parâmetro do sistema apresente um com-

portamento singular. A este parâmetro dá-se o nome de "parâmetro de ordem". Em uma transição ordem-desordem, esta é uma quantidade termodinâmica definida de modo que tenha valor zero na fase desordenada e possua valor diferente de zero na fase ordenada [18]. Frequentemente a escolha do parâmetro de ordem para uma transição particular é óbvia, tal como na transição ferromagnética, onde a magnetização  $m$  é o parâmetro de ordem, sendo  $m = 0$  na fase desordenada e  $m \neq 0$  na fase ordenada.

Para dar mais clareza aos conceitos consideremos o modelo de Ising bidimensional, definido pelo Hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i \sigma_j) - B \sum_i (\sigma_i), \quad (2.1)$$

$i$  e  $j$  são índices indicando a posição na rede,  $J > 0$  é a interação de troca entre sítios adjacentes e  $\langle i,j \rangle$  significa que a soma é para ser feita entre sítios vizinhos próximos.  $B$  é o campo aplicado e  $\sigma$  é uma variável aleatória que pode assumir os valores  $\pm 1$ .

A magnetização do sistema é dada por:

$$m(\beta, B) = \lim_{N \rightarrow \infty} m_N(\beta, B) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \vec{S}_i \right\rangle_N. \quad (2.2)$$

Portanto a magnetização espontânea pode ser obtida pelo limite  $m_0(\beta) = \lim_{B \rightarrow 0} m(\beta, B)$ . A função de correlação spin-spin em uma rede de  $N$  sítios é definida por:

$$G(i, j)_N = \langle [\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle_N] [\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle_N] \rangle_N = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_N - m_N^2, \quad (2.3)$$

que mede a flutuação de  $\sigma$  entre dois pontos  $(i, j)$  da rede. No limite termodinâmico  $G(i, j) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - m^2$ . Considerando  $|\vec{r}|$  como a distância ( $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ ) entre pontos  $(i, j)$ ,  $G(\vec{r})$  pode ser escrita como:

$$G(r) = \langle [\sigma(r) - \langle \sigma(r) \rangle] [\sigma(0) - \langle \sigma(0) \rangle] \rangle. \quad (2.4)$$

Para  $B = 0$ , e temperaturas,  $T$ , maiores que a temperatura crítica  $T_c$ ,  $m_N = 0$ . Em sistemas finitos e  $B = 0$  não há transição e portanto  $m_N = 0$  sempre. Por outro lado se o sistema tem *ordem de longo alcance* teremos

$$\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} G(\vec{r}) \rightarrow m_0^2 \neq 0. \quad (2.5)$$

Próximo ao ponto crítico ( $H = 0, T \rightarrow T_c$ ) e para grandes distâncias  $|\vec{r}|$ , as funções de

correlação spin-spin se comportam como [19]

$$\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} G(\vec{r}) \rightarrow \exp -\frac{r}{\xi}, \quad (2.6)$$

onde  $\xi$  é o comprimento de correlação que mede o tamanho médio dos aglomerados correlacionados e  $\eta$  é o expoente crítico associado à função de correlação.

À medida que a transição de fase é aproximada, o comprimento de correlação se torna muito grande, divergindo como

$$\xi \propto |t|^{-\nu}, \quad (2.7)$$

onde  $\nu$  é o expoente crítico do comprimento de correlação e  $t = \frac{|T-T_c|}{T_c}$  mede a distância ao ponto crítico. No ponto crítico ( $H = 0, t = 0$ ) temos o seguinte comportamento assintótico para  $r$  grande:

$$\lim_{|\vec{r}| \rightarrow \infty} G(\vec{r}) \rightarrow r^{-(d-2+\eta)}. \quad (2.8)$$

Além das correlações espaciais pode-se definir correlações temporais para as flutuações do parâmetro de ordem [19]. A escala de tempo típica para o decaimento das flutuações é o tempo de correlação  $\tau_c$ . À medida que o ponto crítico é aproximado, o tempo de correlação diverge como

$$\tau_c \propto \xi^z \propto |t|^{-z\nu}, \quad (2.9)$$

onde  $z$  é o expoente dinâmico crítico. Próximo ao ponto crítico,  $T_c$ ,  $\xi$  é a única escala de comprimento característica do sistema [20], assim como,  $\tau_c$  é a única escala de tempo relevante. Em uma transição de fase de segunda ordem o comprimento de correlação é infinito próximo à transição. Flutuações do parâmetro de ordem ocorrem em todas as escalas de tempo e comprimento, e o sistema é dito ser invariante por escala. Como consequência, todos os observáveis podem ser escritos como leis de potência próximo ao ponto crítico. O conjunto correspondente de expoentes, chamados expoentes críticos, caracterizam o comportamento do sistema próximo a uma transição particular. As funções termodinâmicas de interesse estão intimamente ligadas a esses expoentes críticos e estão relacionadas a funções de escalas que dependem de parâmetros externos. Os parâmetros externos são: a temperatura reduzida,  $t = \frac{|T-T_c|}{T_c}$  e campo externo  $B$ . O campo magnético e o parâmetro  $|t|$  se transformam de acordo com uma mudança na escala de comprimento. O modo como essa transformação acontece foi inicialmente elaborada por Kadanoff [21] e generalizada por Wilson [22]. Kadanoff estabeleceu a relação entre uma quantidade física  $g$  em uma dada escala de comprimento  $L$  e esta mesma quantidade reescalada  $g'$ , em uma outra escala de comprimento  $L' = \frac{L}{b}$ . O fator de escala  $b$  é um número positivo qualquer.

Para ser específico, considere o hamiltoniano 2.1 com  $N$  spins em uma rede de dimensão  $d$  com parâmetro de ordem definido pela magnetização  $m$  da eq. 2.2. De acordo com a equação 2.6 pode-se admitir, quando próximo ao ponto crítico ( $H = 0, t \approx 0$ ), que existem regiões onde os spins estão altamente correlacionados (ver rede da figura 2.1).

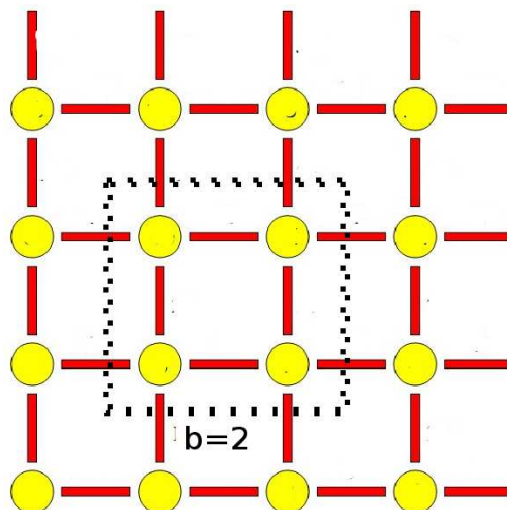


Figura 2.1: Perto da temperatura críticas o comprimento de correlação  $\xi$  é muito grande de forma que os sítios dentro da área tracejada devem estar fortemente correlacionados.

Cada região, como a tracejada na figura 2.1, tem dimensão  $b$  ( $b \ll \xi$ ) e contém  $b^d$  spins altamente correlacionados de modo que pode ser tratada como se fosse um único spin. Neste caso podemos imaginar uma nova rede (com uma nova escala de comprimento) onde cada bloco desses spins pode ser substituído por uma nova variável de spin efetivo  $\theta$ . O número de spins efetivos é determinado em função de  $b$  tal que  $N' = \frac{N}{b^d}$ . Desta forma supõe-se que o hamiltoniano efetivo seja *semelhante* ao original

$$H' = -J' \sum_{\langle i,j \rangle} (\theta_i \theta_j) - B' \sum_i (\theta_i), \quad (2.10)$$

mas com novos parâmetros,  $J'$  e  $B'$ . Como  $J$  define a temperatura crítica, e consequentemente a temperatura reduzida  $t$ ,  $J'$  se relaciona a um nova temperatura reduzida  $t'$ . Como os hamiltonianos têm a mesma forma espera-se que a energia livre  $G(B, t) = Ng(B, t)$  se mantenha nessa transformação alterando portanto, o valor da energia livre por spin



$(g(B,t)) :$

$$\begin{aligned} Ng(B,t) &= N'g(B',t') \\ Ng(B,t) &= \frac{N}{b^d}g(B',t') \\ g(B,t) &= \frac{g(B',t')}{b^d}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

A hipótese de similaridade[21], que consiste em supor:

$$t' = b^{y_t}t \quad (2.12)$$

$$B' = B^{y_B}, \quad (2.13)$$

relaciona os parâmetros externos na transformação. Isso dá origem à relação de homogeneidade para a parte singular da densidade de energia livre,

$$g(t, B) = b^{-d}g(tb^{y_t}, Bb^{y_B}). \quad (2.14)$$

Na eq. 2.14  $y_t$  e  $y_B$  são expoentes críticos. De forma análoga temos para o comprimento de correlação  $\xi' = \frac{\xi}{b}$ :

$$\xi(t, B) = bg(tb^{y_t}, Bb^{y_B}). \quad (2.15)$$

O comportamento crítico fica mais claro ao considerar  $b = t^{-\frac{1}{y_t}}$ :

$$\xi(t, B) = |t|^{-\frac{1}{y_t}}g(Bt^{-\frac{y_B}{y_t}}). \quad (2.16)$$

Logo identifica-se  $\nu = \frac{1}{y_t}$ . Relações análogas para outras quantidades termodinâmicas podem ser obtidas ao derivar  $g$ . A hipótese de homogeneidade 2.14 foi obtida primeiro de forma fenomenológica por Widom [23]; mas pode ser obtida dentro do contexto da teoria do grupo de renormalização [22]. Na tabela 2.1 vemos o comportamento crítico de algumas grandezas físicas e seus respectivos expoentes críticos.

	expoente	definição	condição
calor específico	$\alpha$	$C \propto  t ^{-\alpha}$	$t \rightarrow 0, B = 0$
parâmetro de ordem	$\beta$	$m \propto  t ^\beta$	$t \rightarrow 0$ por baixo, $B = 0$
susceptibilidade	$\gamma$	$\chi \propto  t ^{-\gamma}$	$t \rightarrow 0, B = 0$
comprimento de correlação	$\nu$	$\xi \propto  t ^{-\nu}$	$t \rightarrow 0, B = 0$
função correlação	$\eta$	$G(r) \propto  r ^{-d+2-\eta}$	$t \rightarrow 0, B = 0$
dinâmico	$z$	$\tau_c \propto \xi^z$	$t \rightarrow 0, B = 0$

Tabela 2.1: Tabela com o comportamento crítico de algumas grandezas físicas e seus respectivos expoentes críticos

Uma das características mais importantes das transições de fase é a universalidade. Os

expoentes críticos são os mesmos para uma classe inteira de transições de fase, que podem ocorrer em sistemas físicos distintos. Essas classes de universalidade são determinadas apenas pelas simetrias do parâmetro de ordem, pela dimensionalidade do sistema e pelo alcance das interações. Isso implica que os expoentes críticos de uma transição de fase que ocorre na natureza podem ser, em princípio, determinados exatamente pela investigação de qualquer modelo simples pertencente à mesma classe de universalidade.

Os expoentes críticos  $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$  podem ser obtidos a partir da energia livre e não são independentes. Os vínculos entre os expoentes são descritos pelas relações de escala:

$$2 - \alpha = 2\beta\gamma, \quad 2 - \alpha = \beta(\delta + 1) \quad (2.17)$$

Analogamente os expoentes do comprimento de correlação e da função correlação proporcionam relações de hiperescala:

$$2 - \alpha = 2d\nu, \quad \gamma = (2 - \eta)\nu \quad (2.18)$$

## 2.2 Transições de fase quânticas

Flutuações térmicas são responsáveis por transições de fase clássicas enquanto uma transição de fase quântica ocorre em  $T = 0$ , quando um parâmetro não-térmico,  $g$ , do sistema é variado. Em transições quânticas escalas de energia,  $\Delta$ , tempo,  $\tau$ , e comprimento,  $\xi$ , estão intrinsecamente ligadas. À medida que o parâmetro  $g$  aproxima-se de seu valor crítico,  $g_c$ , o sistema é mais e mais dominado pelos parâmetros  $\Delta$ ,  $\tau$ , e  $\xi$ . Para compreender como estes parâmetros dominam o comportamento crítico do sistema descrevemos inicialmente os conceitos principais de uma transição quântica. Posteriormente vamos estudar um exemplo simples para facilitar a compreensão do caso genérico: o modelo de Ising com campo transversal.

Na fase desordenada o estado fundamental é separado do primeiro estado excitado por um *gap* de energia. À medida que se aproxima do ponto crítico,  $g_c$ , o *gap* se torna progressivamente menor, criando um ponto não analítico. Um ponto não-analítico na energia do estado fundamental caracteriza uma transição de fase quântica.

Nesta tese trataremos somente de transições contínuas de segunda ordem quando ocorre o que se chama "um cruzamento de energias evitado" (*avoided-level crossing*).

A transição de fase é acompanhada por mudanças qualitativas na natureza das correlações do sistema caracterizando a transição de fase. Nessas transições, existe uma escala

de energia característica  $\Delta$  que tende a zero quando  $g$  se aproxima do ponto crítico.

O comportamento de  $\Delta$  próximo do ponto crítico é descrito por [24]:

$$\Delta \sim J|g - g_c|^{z\nu}, \quad (2.19)$$

onde  $J$  é a escala de energia microscópica do sistema. O valor de  $z\nu$  é universal, isto é, independentemente dos detalhes microscópicos do Hamiltoniano. O comportamento (2.19) é válido tanto para  $g > g_c$  quanto para  $g < g_c$ , com o mesmo valor de  $z\nu$ , mas com constantes de proporcionalidade não universais. Transições de fase de segunda ordem têm comprimento de correlação,  $\xi$ , divergente ao aproximar-se do ponto crítico. A divergência do comprimento de correlação é dada por:

$$\xi^{-1} \sim \Lambda|g - g_c|^\nu, \quad (2.20)$$

onde  $\nu$  é o mesmo expoente da Eq. (2.19) e  $\Lambda$  é uma escala para o inverso do comprimento. A razão entre os expoentes da eq. (2.19) e eq. (2.20) é  $z$ , o expoente dinâmico crítico. Comparando essas duas equações obtemos que:

$$\Delta \sim \xi^z. \quad (2.21)$$

Na vizinhança do Ponto Crítico Quântico(PCQ), as flutuações espaciais e temporais ocorrem em todas as escalas, de modo que o sistema é invariante por escala. É desta invariância que se origina o comportamento tipo lei de potência para as grandezas características do sistema. O valor de  $z$  afeta fortemente o comportamento estático e crítico, o que pode ser visto observando que as relações de hiperescala para o modelo quântico diferem das relações usuais de temperatura finita de um modo fundamental, no qual a dimensão  $d$  é substituída por  $d + z$ [6].

Como todos os experimentos são necessariamente realizados a alguma temperatura diferente de zero, a teoria de transição de fase quântica é construída de modo a descrever as consequências dessa singularidade em  $T = 0$  quando analisamos propriedades físicas em  $T > 0$ .

Em sistemas tridimensionais a ordem pode persistir até uma temperatura finita. Na região  $T > 0$  e  $g < g_c$  existe portanto uma linha de transições contínuas  $T_c(g)$  na qual as flutuações térmicas destroem a ordem do sistema. À medida que  $g$  se aproxima de  $g_c$ , as flutuações quânticas contribuem para desordenar o sistema e reduzem a temperatura da transição até o ponto crítico quântico onde  $T_c(g_c) = 0$ . Próximo de tais linhas, a frequência característica,  $\omega_c$ , das flutuações de longa distância do parâmetro de ordem

podem ser associadas à energia de excitação do sistema,  $\hbar\omega_c$ . As flutuações quânticas serão importantes desde que essa escala de energia seja maior que a energia térmica do sistema ( $k_B T_c$ ). Logo, para uma transição ocorrendo em uma temperatura finita  $T_c$ , as flutuação quânticas perdem sua importância para :

$$k_b T_c \gg \hbar\omega_c \propto \xi^{-z} \propto \left|1 - \frac{T}{T_c}\right|^{\nu z},$$

ou seja, quando

$$\left|1 - \frac{T}{T_c}\right| < T_c^{\frac{1}{z\nu}}. \quad (2.22)$$

Desta forma o comportamento crítico poderá ser descrito classicamente para pontos suficientemente próximos do ponto de transição. Na figura 2.2 esta região é delimitada pela área sombreada ( $|t| < T_c^{\frac{1}{z\nu}}$ ) em torno da linha sólida. A natureza quântica do sistema ainda influencia quantitativamente, mas as flutuações térmicas dominam a escala macroscópica que controla o comportamento crítico. Existe uma região intermediária entre ordem e desordem chamada região crítica quântica, onde ambos os tipos de flutuações são importantes. Ela é localizada próximo de  $g = g_c$  mesmo para temperaturas relativamente altas. O limite dessa região é determinado pela condição  $k_b T > k_b T_c > \hbar \propto |g - g_c|^{\nu z}$ .

A condição na qual o comportamento do sistema muda de clássico para quântico pode ser entendida. Para isso é preciso analisar a avaliação da função de partição através mapeamento do sistema quântico de dimensão  $d$  para um sistema clássico efetivo de dimensão  $d+1$  (Apêndice A). Consideramos a função de partição

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}. \quad (2.23)$$

onde  $\hat{H}$  é o operador de energia e  $\beta$  é o inverso da temperatura. Fazendo a continuação analítica para tempo imaginário,  $\beta = i\frac{\tau}{\hbar}$ , podemos visualizar  $Z$  como uma soma de propagadores, similar a uma integral de caminho de Feynman. Em baixas temperaturas termos individuais do Hamiltoniano não comutam e uma descrição quântica é necessária. À medida que se aproxima da linha de transições  $T(g) > 0$ , o tempo de correlação do sistema diverge ( $\tau \propto \xi^z \gg \beta$ ) de tal forma que o sistema na direção imaginária fica completamente correlacionado e os termos do Hamiltoniano passam a comutar. Vemos que a condição  $\tau \propto \xi^z \gg \beta$  é equivalente a  $\hbar\omega \ll k_b T$  dado que  $\omega \propto \frac{1}{\tau}$  e  $\beta = \frac{1}{T}$ . A transição entre esse dois regimes (clássico e quântico) pode ser considerada de forma similar a um sistema finito anisotrópico com diferentes escalas de comprimento ( $\frac{\xi}{|t|^{\nu_{\parallel}}}, \frac{\xi_{\tau}}{|g|^{\nu_{\perp}}}$ ) onde  $\beta$  é o tamanho finito na direção de tempo imaginário.

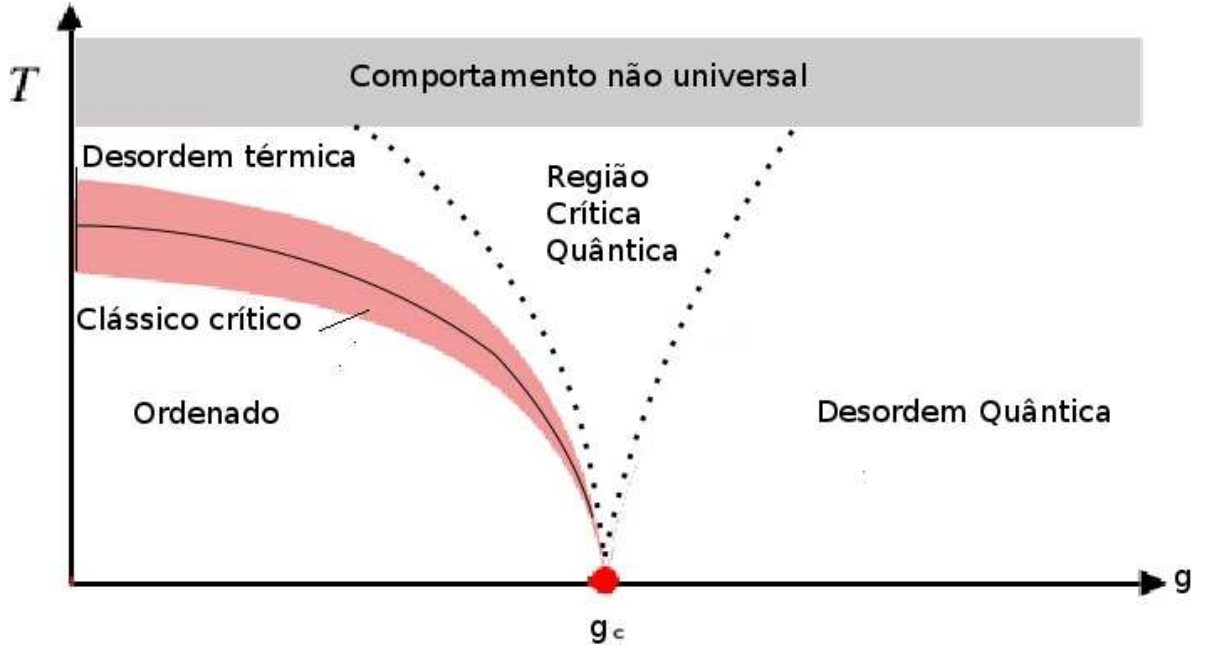


Figura 2.2: Esquema do diagrama de fase de uma transição quântica de temperatura  $T$  por parâmetro  $g$ . A linha sólida separa a fase ordenada da desordenada. A área sombreada indica a região clássica crítica. A linha tracejada separa a região crítica onde tanto flutuações térmicas quanto quânticas são importantes. O limite dessa região é determinado pela condição  $k_b T > \hbar \propto |g - g_c|^{\nu z}$ .

### 2.2.1 Exemplo: Ising com campo transverso

O Hamiltoniano do modelo de Ising unidimensional com  $N$  spins com campo transverso  $h$  é dado por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} (\sigma_i^z \sigma_j^z) + h \sum_i S_i^x, \quad (2.24)$$

onde  $h$  é o campo aplicado,  $J > 0$  estabelece interações ferromagnéticas e  $\sigma_i^z$  é a componentes de spin de Pauli no sítio  $i$ .  $N = L * a$ , onde  $L$  é o comprimento do sistema e  $a$  é a distância entre os sítios. O parâmetro de controle conveniente para investigar a transição de fase quântica é  $g = \frac{h}{J}$ . Este controla a interação entre os graus de liberdade do sistema. Vamos acompanhar a evolução do estado fundamental em função de  $g$ .

O estado fundamental,  $|0\rangle$ , desse modelo, para  $g = 0$ , ocorre quando os spins estão todos na direção  $\pm z$ , ou seja,

$$|0\rangle \equiv |\uparrow\rangle = \prod_i |\uparrow\rangle_i \quad \text{ou} \quad |0\rangle \equiv |\downarrow\rangle = \prod_i |\downarrow\rangle_i.$$

O estado fundamental para  $g$  pequeno pode ser caracterizado pelas correlações em  $\sigma_i^z$ . A teoria de perturbação aplicada no limite de  $g$  pequeno sugere que :

$$\lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \langle 0 | \sigma_i^z \sigma_j^z | 0 \rangle = m_0^2, \quad (2.25)$$

onde  $m_0^2 = \langle (\sigma_i^z)^2 \rangle$  é a magnetização quadrática por spin (parâmetro de ordem). Essa relação é equivalente à obtida na Eq. (2.5).

Por outro lado, para  $g$  grande os spins se alinham na direção do campo de modo que neste limite o estado fundamental pode ser aproximado por:

$$| \rightarrow \rangle = \prod_i | \rightarrow \rangle_i \quad \text{sendo} \quad | \rightarrow \rangle_i = \frac{(| \uparrow \rangle_i + | \downarrow \rangle_i)}{\sqrt{2}}.$$

Para correções perturbativas em  $\frac{1}{g}$  espera-se que as correlações sejam de curto alcance e portanto tenham um comprimento de correlação finito  $\xi$ :

$$\langle 0 | \sigma_i^z \sigma_j^z | 0 \rangle \sim e^{-\frac{|i-j|}{\xi}}. \quad (2.26)$$

Vê-se que não há uma forma contínua na qual o comportamento (2.25) se transforme no resultado (2.26), assim esperamos um comportamento singular de  $\xi$  para algum valor intermediário  $g_c$  de  $g$ . Para  $g < g_c$  temos que  $\xi$  diverge ao se aproximar de  $g_c$ . Precisamente no ponto crítico  $g_c$  o comprimento de correlação  $\xi$  segue uma lei de potência em  $|i-j|$ . A magnetização espontânea  $m_0$  se comporta como uma lei de potência em  $g$  à medida que aproxima de  $g_c$ , portanto pode-se concluir que esse ponto crítico  $g_c$  separa o estado ordenado  $g < g_c$  do estado desordenado  $g > g_c$ . A distância  $|g_c - g|$  está associada à escala de energia das excitações acima do estado fundamental. O espectro de excitação<sup>1</sup> do sistema é dado por:

$$\begin{aligned} \epsilon(l) &= 2 \left( h^2 + J^2 - 2hJ \cos\left(\frac{\pi l}{N}\right) \right)^{\frac{1}{2}} & A.28 \\ \epsilon(l) &= 2J \left( \left(\frac{h}{J}\right)^2 + 1 - 2\frac{h}{J} \cos\left(\frac{\pi l}{N}\right) \right)^{\frac{1}{2}} \\ \epsilon(k) &= 2J \left( g^2 + 1 - 2g \cos(k2a) \right)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

na qual  $k = \frac{2\pi l}{L}$ .

Para  $g_c(N) = \cos\left(\frac{\pi}{N}\right) \pm \sin\left(\frac{\pi}{N}\right)$  encontra-se o mínimo da energia  $\epsilon(N) = 2J \sin(N)$ .

---

<sup>1</sup>Esse espectro pode ser obtido por um mapeamento desse sistema para um sistema de férmions itinerantes[7].

Vemos que a menor energia de excitação é  $E_1 = \Delta = 2J|1 - g|$ . Na figura 2.3 o cruzamento entre os níveis de energia é evitado pelo tamanho finito da rede. No limite de tamanho infinito ( $N \rightarrow \infty$ )  $g_c = 1$  e  $\Delta = 0$ , desta forma há um contínuo para o espectro de excitação, o estado fundamental é *gapless*. Para  $g > g_c$  o estado é desordenado mesmo para  $T = 0$  e é denominado paramagneto quântico. Para  $g < g_c$  o estado é ordenado apenas em  $T = 0$ .

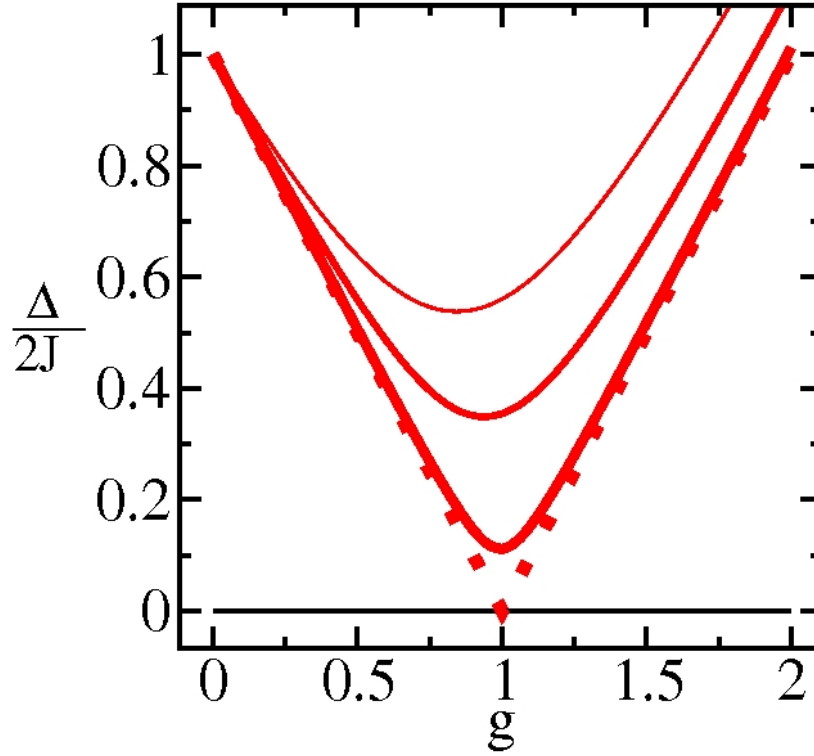


Figura 2.3: Cruzamento evitado de níveis (*avoided level cross*) entre o estado excitado  $E_1$  e o estado fundamental  $E_0$  no modelo de Ising com campo transversal. A energia do estado fundamental se torna não analítica no limite de sistema infinito quando a separação de energia (*gap*)  $\Delta$  desaparece no ponto crítico  $g = g_c = 1$ .

A energia da eq. A.28 foi obtida pelo mapeamento do modelo de Ising unidimensional com campo transversal para o modelo de Ising clássico equivalente em uma rede retangular com interações anisotrópicas. O modelo clássico equivalente tem dimensão  $N \times M$ , onde  $M$  é a dimensão de Trotter. Para garantir convergência da solução é necessário manter  $\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\beta}{M}$  constante. Essa dimensão adicional proporcional a  $\beta$ , é um resultado geral devido à dinâmica intrínseca dos sistemas quânticos. Dessa forma, A.28 nos fornece a energia para excitar um único spin (*spin flip*) de uma rede  $N \times \beta$  de spins de Ising. Os cálculos levando a este resultado podem ser encontrados no apêndice A onde usamos a decomposição de Suzuki-Trotter.

Conhecendo o espectro de excitação é possível descobrir o comportamento do compri-

mento de correlação  $\xi$  para temperaturas entre  $0 < T < \Delta$  e  $g < g_c$ . As menores excitação ficam em torno de  $k$  pequeno, logo  $e(k) \approx \Delta + \frac{(2aJk)^2}{2\Delta}$ . Se o comprimento médio relativo a essas excitações for muito maior que o comprimento de onda de De Broglie ( $\lambda = \frac{(2Ja)^2}{T\Delta}$ ) espera-se que as excitações se comportem classicamente. De acordo com a estatística de Boltzman a densidade dessas excitações é dada por:

$$\rho = \int \frac{dk}{2\pi} e^{-\beta e(k)} = \left(\frac{T\Delta}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\beta\Delta}, \quad (2.27)$$

de modo que a função de correlação é calculada como [7]:  $C(r = |x_i - x_j|) = m_0^2 e^{-2pr}$ , onde  $m_0$  é a magnetização do estado fundamental. Nessa região temos portanto uma descrição clássica, "renormalizada" pelas flutuações quânticas contidas em  $m_0$ . Podemos identificar o comprimento de correlação (clássico) como

$$\xi_c = \left(\frac{2\pi}{T\Delta}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{\Delta}{T}}. \quad (2.28)$$

Essa aproximação é consistente com  $e^{\frac{\Delta}{T}} \gg \frac{(2Ja)^2}{T\Delta}$ . Vemos que o comportamento do sistema depende da razão de  $\Delta$  e  $T$ . De forma similar obtêm-se para o tempo de coerência,  $\tau = T^{-1} e^{\frac{\Delta}{T}}$ .

### 2.2.2 Tempo e o expoente crítico dinâmico

Perto do ponto crítico  $g_c$  o tempo escala de acordo com  $\tau' = b^z \tau$ . Isto define o expoente crítico dinâmico  $z$ . O caráter quântico das flutuações conectam tempo e energia tal que  $z$  se relaciona com o expoente  $y$  da interação  $J$ . Essa conexão pode ser realizada por meio das flutuações críticas:

$$\Delta J' = b^{-y} \Delta J \quad \Delta \tau' = b^{-z} \Delta \tau. \quad (2.29)$$

A relação de incerteza  $\Delta J \Delta \tau$  é invariante por escala, ou seja,

$$\Delta J' \Delta \tau' = b^{-y+z} \Delta J \Delta \tau, \quad (2.30)$$

portanto  $y = z$  e a relação de hiperscala pode ser escrita como:

$$2 - \alpha = \nu(d + z). \quad (2.31)$$

Vemos que esta é a mesma relação clássica de hiperscala se utilizamos a dimensão efetiva  $d_{ef} = d + z$ . Observamos isso quando obtivemos a energia por spin na equação A.28 do modelo de ising unidimensional com campo transversal por meio do mapeamento



do sistema quântico  $d = 1$  para o sistema de Ising clássico bidimensional  $d = 1 + 1$ . Isso nos leva a crer que  $z = 1$ . Como a  $d_e f$  é aumentada, é possível atingir a dimensão crítica superior no caso dos expoentes associados à transição em  $T = 0$ . Neste caso, os expoentes críticos deverão assumir valores de campo médio, como é o caso da transição de fase quântica estudada nesta tese.

### 2.2.3 Escala próximo do ponto crítico em $T = 0$

Para analisar como um sistema quântico escala em  $T = 0$  próximo do ponto crítico, vamos considerar o Hamiltoniano 2.24 na presença de um campo longitudinal  $B$ :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j}^N (\sigma_i^z \sigma_j^z) + h \sum_i S_i^x + B \sum_i S_z^x. \quad (2.32)$$

Em uma transformação de escala de comprimento  $b$  (veja Eqs. (2.11) a (2.16)), obtemos [6]:

$$J' = b^{-y} J \quad h' = b^{-y} h \quad g' = b^a g \quad B' = b^x B, \quad (2.33)$$

na qual considerou-se  $g \equiv |\frac{h}{J} - (\frac{h}{J})'|$  e que  $(\frac{h}{J})' = \frac{h}{J}$  no ponto fixo. A parte singular da densidade de energia,  $E_s$ , pode ser escrita em termos da função de escala  $f$  como:

$$E_s = J f(g, \frac{B}{J}) \quad (2.34)$$

de modo que

$$E g' = b^d E_s = J' f(g', \frac{B'}{J'}), \quad \xi' = \xi(g', \frac{B'}{J'}) = b^{-1} \xi(g, \frac{B}{J}). \quad (2.35)$$

Usando as relações 2.33 e 2.35 obtemos:

$$\frac{E_s(g, \frac{B}{J})}{J} = b^{-d+y} f(g b^a, b^{x+y} \frac{B}{J}) \quad (2.36)$$

$$\xi(g, \frac{B}{J}) = b \xi(g b^a, b^{x+y} \frac{B}{J}). \quad (2.37)$$

Como  $b$  é arbitrário podemos escolher  $b = g^{-\frac{1}{a}}$  para obter:

$$\begin{aligned} \frac{E_s}{J} &= g^{\frac{(d+y)}{a}} f(1, g^{-\frac{(x+y)}{a}} \frac{B}{J}) \\ \xi(g, \frac{B}{J}) &= g^{\frac{-1}{a}} \xi(1, g^{-\frac{x+y}{a}} \frac{B}{J}), \end{aligned} \quad (2.38)$$

na qual se identifica o expoente do comprimento de correlação  $\nu = \frac{1}{a}$  e o expoente  $\Delta = \nu(x + y)$ . Da singularidade de  $E_s$  podemos definir o expoente  $\alpha$  e obter:

$$2 - \alpha = \nu(d + y) \quad (2.39)$$

A partir da magnetização  $m = \langle S^z \rangle = -\frac{\partial E_s}{\partial B} |_{B=0} \propto |g|^\beta$  e da susceptibilidade  $\chi = -\frac{\partial^2 E_s}{\partial B^2} |_{B=0} \propto |g|^{-\gamma}$  obtemos a relação de escala:

$$\alpha + 2\beta\gamma = 2 \quad (2.40)$$

### 2.2.4 Extensão à temperatura finita

Como procuramos descrever o sistema a baixa temperaturas devemos introduzi-la nas funções de escala (Eq. 2.36 e 2.37) considerando

$$\left(\frac{T}{J}\right)' = b^y \frac{T}{J}. \quad (2.41)$$

Uma vez que  $J$  define a escala de energia do sistema e com a escolha  $b^{1/\nu} g = 1$  obtemos:

$$\left(\frac{T}{J}\right)' = |g|^{-y\nu} \frac{T}{J}. \quad (2.42)$$

Desta forma, o comprimento de correlação e a densidade de energia livre podem ser escritos como:

$$\xi = |g|^{-\nu} f(|g|^{-(\beta+\gamma)} \frac{B}{J}, |g|^{-y\nu} \frac{T}{J}) \quad (2.43)$$

$$f = |g|^{2-\alpha} f_E(|g|^{-(\beta+\gamma)} \frac{B}{J}, |g|^{-y\nu} \frac{T}{J}) \quad (2.44)$$

Podemos identificar  $\Delta = J|g|^{-z\nu}$  como uma escala de energia relevante do sistema e a razão  $r = \frac{\Delta}{T}$  pode ser usada como um indicador sobre qual regime o sistema se encontra (ordenado  $g < 0, r \ll 1$ , clássico renormalizado  $g < 0, r \approx 1$ , crítico quântico  $|g| \approx 0, r \gg 1$  e desordenamento quântico  $g > 1, r \ll 1$ ). Vemos explicitamente esta razão  $\frac{\Delta}{T}$  no comprimento de correlação Eq. 2.28 calculado na seção anterior.

## 3 Monte Carlo Quântico

### 3.1 Introdução

Métodos de Monte Carlo Quântico (MCQ) são técnicas de simulação que permitem estudar sistemas quânticos de muitos corpos em escala antes acessíveis apenas em sistemas clássicos. Os vários algoritmos podem ser classificados em duas categorias principais [25]:

- i ) A discretização em tempo imaginário: Os algoritmos baseados na decomposição de Suzuki-Trotter [26], [27] permitem o mapeamento da função de partição de um sistema quântico de dimensão  $d$  para uma função de partição de um sistema clássico equivalente de dimensão  $d + 1$  (dimensão de Trotter). Desta forma, algoritmos usuais de Monte Carlo clássico podem ser usados. Em certos casos, dependendo do Hamiltoniano e da decomposição utilizada, esse mapeamento pode gerar configurações não físicas (com energias infinitas), efetivamente definindo um classe de configurações proibidas, dificultando a geração de novas configurações. O número de configurações proibidas aumenta com a dimensão de Trotter. Um forma de minimizar a geração de configurações proibidas é restringir à alterações exclusivamente locais, entretanto, essa medida faz com que o tempo de autocorrelação cresça rapidamente em função do tamanho do sistema. O algoritmo de laço (*loop*) na representação de linhas globais (*world line*) superou esse problema usando tempo imaginário contínuo e alterações não-locais nas configurações do sistema[28]. Em geral, a desvantagem do algoritmo de *loop* é a dificuldade de atualizações de configuração não-locais para certas interações importantes, como, por exemplo, campos magnéticos externos. No apêndice A mostramos como a decomposição Suzuki-Trotter pode ser utilizada para mapear um sistema quântico unidimensional para um sistema clássico efetivo bidimensional, no qual os usuais algoritmos de Monte Carlo poderiam ser usados.
- ii ) Expansão em série estocástica da função de partição, referido como algoritmo SSE (Stochastic Series Expansion). Este algoritmo usa uma extensão do método de Handscomb[29]

e tem sido aplicada em vários modelos com interações ferromagnéticas e spin  $\frac{1}{2}$  [30, 31]. Em particular, resultados rigorosos para as grandezas críticas ( $T_c$ , expoentes,  $\beta, \gamma, \nu$ ) do modelo de Heisenberg 3d foram obtidos [32]. Essa técnica [33], [34] supera algumas das dificuldades encontradas na expansão de Suzuki-Trotter. Como veremos, quando a ordem de expansão,  $n \rightarrow \infty$ , o algoritmo SSE é numericamente exato. Utilizando a alteração de configuração global como em *loop-cluster* [35], [11], o tempo de autocorrelação é altamente reduzido, mesmo na região crítica. Campos magnéticos externos ou potenciais químicos também podem ser incluídos sem perda significativa de eficiência. Devido a essa vantagem, decidimos utilizar este método.

### 3.1.1 Implementações realizadas

Para obter maior entendimento da representação SSE implementou-se à guisa de teste o algoritmo com alteração de laço determinístico (*loop-update*) obtendo resultados coerentes com a literatura. Esse algoritmo é insuficiente para tratar o problema proposto nesta tese. Portanto, implementamos o método SSE com laço dirigido para obter os resultados iniciais desta tese na qual nossa maior contribuição foi encontrar o peso de *update* (alteração) mais apropriado (*locally optimal*). Mesmo com essa implementação, grande parte dos resultados desta tese foram obtidos a partir do programas disponíveis no projeto ALPS (descrito a seguir), devido à maior estabilidade e eficiência na implementação.

## 3.2 ALPS

Uma dificuldade típica para quem começa a lidar com MCQ é a variedade de métodos disponíveis. Isso se deve às subdivisões possíveis no algoritmo, tais como representação dos estados (*worldline, sse, continuous time*), alteração das configurações (*worm, loop, directed loop*) e peso de alteração (*heat bath, locally optimal* ou *minimal bounce*). Entender profundamente cada opção e implementar o algoritmo pode exigir muito tempo. Para deixar esses métodos mais acessíveis à comunidade científica, um esforço em grupo foi realizado para desenvolver uma biblioteca que, posteriormente, foi utilizada para implementar diversos desses algoritmos: o projeto ALPS (Algorithms and Libraries for Physics Simulations) [36]. Apesar de existir uma implementação desses algoritmos, um entendimento detalhado sobre seu funcionamento é recomendado, porque a documentação sobre os programas ainda é insuficiente por mais que tenha evoluído. Também é recomendado bom conhecimento do algoritmo caso deseje realizar medidas customizadas. Afim de for-

necer uma base de conhecimento dos algoritmos utilizados nessa tese, uma descrição do método SSE é dada nas próximas seções.

### 3.3 Detalhes do método SSE

Nessa seção será feita uma descrição do método SSE. Esse método e diversas variações dele foram publicadas em uma diversidade de artigos[34, 35, 37, 38, 11, 39, 40, 41]. Uma boa descrição de aplicação simples do método pode ser encontrada na dissertação [25]. As próximas seções são em grande parte, traduções livres dessa dissertação. Apenas as partes essenciais foram mantidas. Nesse capítulo vamos focar na representação gráfica e explicação dos conceitos básicos do método. Os detalhes específicos de implementação serão apenas citados com suas devidas referências.

#### 3.3.1 Algoritmo SSE para Sistemas Clássicos

Antes de considerar o método SSE para solução de problemas quânticos de muitos corpos, vamos primeiro considerar um exemplo clássico. Considere o valor esperado de uma grandeza térmica clássica,

$$\langle f \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} f(\sigma) e^{-\beta E(\sigma)}, \quad Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta E(\sigma)}, \quad (3.1)$$

na qual  $\sigma$  é uma configuração que inclui todos graus de liberdade do sistema, por exemplo, as configurações de spin do modelo de Ising:  $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N\}$ .  $E(\sigma)$  é a energia correspondente e  $\beta = \frac{1}{T}$  é o inverso da temperatura.

No método de Monte Carlo usual, as configurações são sorteadas com a seguinte distribuição de densidade de probabilidade

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} W(\sigma). \quad (3.2)$$

No ensemble canônico, por exemplo,  $W(\sigma)$  é o peso de Boltzmann da configuração  $\sigma$ ,

$$W(\sigma) = e^{-\beta E(\sigma)}. \quad (3.3)$$

O estimador  $\langle f \rangle$  é então a média aritmética da função  $f(\sigma)$  em uma cadeia de Markov com densidade de probabilidade  $P(\sigma)$

$$\langle f \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} f(\sigma) W(\sigma) = \sum_{\sigma} f(\sigma) P(\sigma) = \langle f \rangle_W = \frac{1}{N_{\text{sorteios}}} \sum_i f(\sigma[i]). \quad (3.4)$$

A função exponencial 3.3 é avaliada por uma expansão em série de Taylor, ou seja,

$$W(\sigma) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta E(\sigma))^n}{n!}, \quad (3.5)$$

e reescreve-se a função de partição na forma,

$$Z = \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta E(\sigma))^n}{n!}. \quad (3.6)$$

De maneira que o estimador  $\langle f \rangle$  é

$$\langle f \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} f(\sigma) \frac{(-\beta E(\sigma))^n}{n!}. \quad (3.7)$$

Desse modo aumenta-se o espaço de configuração convencional com uma dimensão de expansão, no qual a nova coordenada a ser sorteada é a ordem de potência  $n$  da expansão em série. Agora, o peso de uma configuração  $(\sigma, n)$  no espaço expandido de configuração  $\sigma, n$  é

$$W(\sigma, n) = \frac{(-\beta E(\sigma))^n}{n!}. \quad (3.8)$$

Podemos aplicar o sorteio de Monte Carlo no espaço expandido de configuração  $\sigma, n$ . Isso funciona desde que os pesos da Eq. (3.8) para todas configurações sejam positivos, o que requer que a energia seja sempre negativa. Infelizmente isso não é sempre o caso, mas podemos subtrair uma constante  $\epsilon$  da energia ( $E'(\sigma) = E(\sigma) - \epsilon$ ) sem que se mude a física. Isso equivale a multiplicar a função de partição e  $f(\sigma)$  por  $\exp(\beta\epsilon)$ , o que não muda o valor de  $\langle f \rangle$  na eq. (3.1). Com tal constante adequada  $\epsilon \geq \max(E(\sigma)) \quad \forall \sigma$ , o peso a ser usado para amostragem do espaço expandido de configuração é

$$W(\sigma, n) = \beta^n \frac{(\epsilon - E(\sigma))^n}{n!} = \frac{(-\beta H(\sigma))^n}{n!}, \quad (3.9)$$

com  $H(\sigma) = [E(\sigma) - \epsilon]$ . Dentro desse formalismo, os valores esperados térmicos podem ser diretamente calculados. O procedimento para gerar novas configurações e avaliar médias é o mesmo que em uma simulação de Monte Carlo convencional, entretanto o peso utilizado é dado pela Eq. (3.9). Um protótipo do algoritmo pode ser visto na figura 3.1. Nessa figura vemos que  $M$  estimativas são realizadas por passo de Monte Carlo e o programa termina após realizar  $P$  passos. No algoritmo completo algumas medidas iniciais são descartadas para reduzir configurações não típicas do equilíbrio térmico.

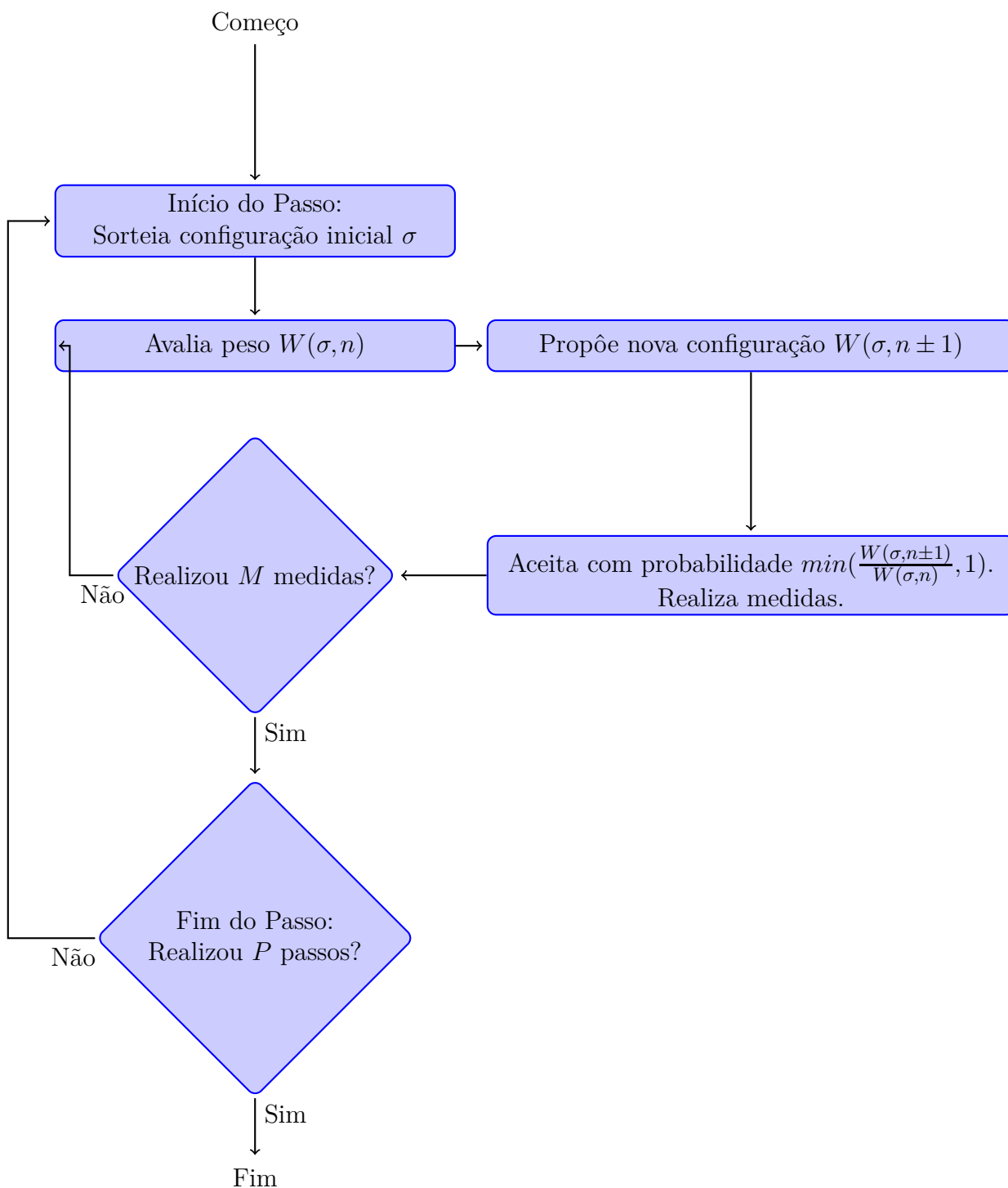


Figura 3.1: Protótipo do Algoritmo SSE clássico para  $P$  passos de Monte Carlo realizando  $M$  medidas por passo.

Tome o estimador  $\langle H \rangle$  ( a energia ) como um exemplo:

$$\begin{aligned}
\langle H \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma, n=0}^{\infty} H(\sigma) W(\sigma, n) \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma, n=0}^{\infty} (H(\sigma) \frac{(-\beta H(\sigma))^n}{n!}) \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma, n=0}^{\infty} (-\frac{\beta H(\sigma)}{-\beta} \frac{(-\beta H(\sigma))^n}{n!}) \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma, n=0}^{\infty} (\frac{n+1}{-\beta} \frac{(-\beta H(\sigma))^{n+1}}{(n+1)!}), \tag{3.10}
\end{aligned}$$

no qual  $H(\sigma) = [E(\sigma) - \epsilon]$ . Alterando o índice para  $m = n + 1$ , podemos reescrevê-la como

$$\langle H \rangle = -\frac{1}{Z\beta} \sum_{\sigma, m=1}^{\infty} (m \frac{(-\beta H(\sigma))^m}{m!}), \tag{3.11}$$

logo o valor da expansão se torna:

$$\begin{aligned}
\langle H \rangle &= -\frac{1}{Z\beta} \sum_{\sigma, m} m W(\sigma, m) \\
&= -\frac{1}{\beta} \langle m \rangle_W \\
\langle [E(\sigma) - \epsilon] \rangle &= -\frac{1}{\beta} \langle m \rangle_W \\
\langle [E(\sigma)] \rangle &= \epsilon - \frac{1}{\beta} \langle n+1 \rangle_W \\
\langle [E(\sigma)] \rangle &= \epsilon - \frac{1}{\beta} - \frac{1}{\beta} \langle n \rangle_W. \tag{3.12}
\end{aligned}$$

Isso é um resultado notável, porque apenas temos que nos preocupar com a ordem da expansão ( $n$ ) para calcular a energia. Como a energia é proporcional ao tamanho do sistema  $E \propto N$ , podemos deduzir que em baixas temperaturas, a média da potência de expansão é proporcional a  $\beta N$ , ou seja,

$$\langle n \rangle_W \propto \beta E = \beta e N, \tag{3.13}$$

na qual  $e$  é a energia por spin.



### 3.3.2 Algoritmo SSE para Sistemas Quânticos

Como no sistema clássico, o ponto de partida do algoritmo SSE quântico é a expansão em série de potências da função de partição:

$$Z = \text{Tr} \left( e^{-\beta \hat{H}} \right) = \sum_{\sigma} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha_{\sigma} | \hat{H}^n | \alpha_{\sigma} \rangle, \quad (3.14)$$

no qual o traço foi escrito como a soma dos elementos diagonais  $\{|\alpha_{\sigma}\rangle\}$ .

Se permitirmos que a ordem de expansão tenda para infinito, não haverá erros sistemáticos. Seguindo a Eq. (3.9), o peso para uma configuração  $(\sigma, n)$  no espaço expandido de configuração  $\sigma, n$  é

$$\hat{W}(\sigma, n) = \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha_{\sigma} | \hat{H}^n | \alpha_{\sigma} \rangle. \quad (3.15)$$

O "toy model" para implementação do algoritmo SSE é o modelo antiferromagnético na rede quadrada (Fig. 3.2) com spin  $\frac{1}{2}$ , que é descrito pelo Hamiltoniano:

$$\hat{H} = J \sum_{\langle i, j \rangle} [\hat{S}_i^x \hat{S}_j^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_j^y + \Delta \cdot \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z] - h \sum_{i=1}^N \hat{S}_i^z - 2N J \epsilon, \quad (3.16)$$

no qual  $\langle i, j \rangle$  denota os vizinhos mais próximos entre os spins,  $J > 0$  indica interações antiferromagnéticas e  $\epsilon \geq \frac{\Delta}{4} + \frac{h}{4J}$  é uma constante positiva para garantir que os elementos diagonais de  $\langle \alpha | (-\beta H)^n | \alpha \rangle$  sejam positivos. Os elementos não-diagonais serão discutidos mais tarde para o caso antiferromagnético, no caso ferromagnético ( $J < 0$ ) estes termos são negativos de forma que todos elementos de matriz  $\langle \alpha | (-\beta H)^n | \alpha \rangle$  são positivos para um valor de  $\epsilon$  adequado.

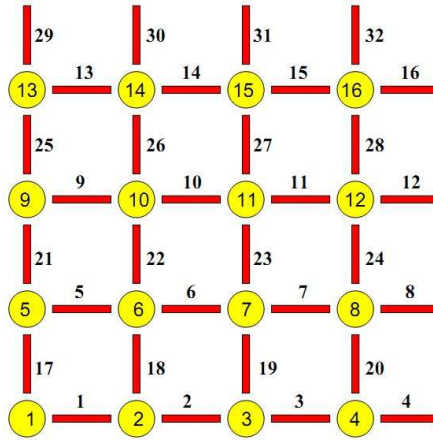


Figura 3.2: Rede bidimensional quadrada com  $L_x = L_y = 4$ . Os círculos denotam spins e as barras entre os spins são ligações. Condições periódicas de contorno são mostradas explicitamente. O número total de spins  $N_s = L_x \times L_y$ ; e o número de ligações  $N_b = 2N_s$ .

Considerando  $\hat{S}_i^z$  como um autovetor do spin no sítio  $i$  temos na base  $\hat{S}^z$ ,

$$|\alpha_\sigma\rangle = |\hat{S}_1^z \otimes \hat{S}_2^z \otimes \dots \otimes \hat{S}_N^z\rangle \quad (3.17)$$

onde  $\sigma$  designa um conjunto formado pelos autovalores de cada spin  $(S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z)$ . O estado  $\sigma$  também pode ser representado por um vetor *spin* tal que  $spin[i]$  contém o autovalor do  $i$ ésimo spin da rede

$$spin[i] = S_i^z. \quad (3.18)$$

Desta forma podemos escrever o Hamiltoniano em termos dos operadores de ligação  $\hat{H}_{a,b}$  no qual o índice  $a$  indica a diagonalidade dos operadores e  $b$  é um índice referente a um par de spins  $\langle i(b), j(b) \rangle$  conectados por uma ligação. Em um sistema bidimensional com interações entre primeiros vizinhos, o número de ligações é dado por  $N_b = 2N$ . Na figura 3.2 é representado os índices de uma rede quadrada  $4 \times 4$ , os números dentro dos círculos são os valores para os índices  $(i, j)$  dos spins da rede e os números nas barras representam os valores possíveis para o índice  $b$  nas ligações entre os spins. Como um exemplo, pode-se ver na figura que os spin de índices 6 e 10 são conectados pela ligação de índice 22. No caso do Hamiltoniano (3.16),

$$\hat{H}_{1,b} = -\Delta S_i^z S_j^z + \frac{\hbar}{2J}(S_i^z + S_j^z) + \frac{\epsilon}{J}, \quad (3.19)$$

são os operadores diagonais ( $a = 1$ ) e

$$\hat{H}_{2,b} = (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y), \quad (3.20)$$

são os operadores não-diagonais ( $a = 2$ ), na qual  $b$  é um índice referente a um par de spins  $\langle i(b), j(b) \rangle$  conectados por uma ligação. Reescrevendo o Hamiltoniano em termos desse operadores obtemos:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= J \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{S}_{i(b)}^x \hat{S}_{j(b)}^x + \hat{S}_{i(b)}^y \hat{S}_{j(b)}^y + \Delta \hat{S}_{i(b)}^z \hat{S}_{j(b)}^z) - \frac{\hbar}{2} \left( \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_{i(b)}^z + \hat{S}_{j(b)}^z \right) \\ &+ 2NJ\epsilon \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\hat{H} = -J \sum_{b=1}^{N_b} (H_{1,b} - H_{2,b}). \quad (3.22)$$

As potências do Hamiltoniano  $\langle \alpha | \hat{H}^n | \alpha \rangle$  na função de partição Eq. (3.14) (para um estado  $\sigma$  qualquer) podem ser expressas como somas de produtos dos operadores de ligação,  $H_{1,b}$  e  $H_{2,b}$ . Tal produto é denominado como uma sequência ou linha de

operadores (*operator sequence, operator string*), isto é:

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \hat{H}^n | \alpha \rangle &= \langle \alpha | (J^n \sum_{b=1}^{N_b} (-\hat{H}_{1,b} + \hat{H}_{2,b}))^n | \alpha \rangle \\
&= J^n \langle \alpha | \prod_{p=n}^1 \left( \sum_a \sum_{b=1}^{N_b} ((-1)^a \hat{H}_{a,b}) \right) | \alpha \rangle \\
&= J^n \langle \alpha | \sum_{a(1)=1}^2 \sum_{b(1)=1}^{N_b} \sum_{a(2)=1}^2 \sum_{b(2)=1}^{N_b} \dots \\
&\quad \sum_{a(n)=1}^2 \sum_{b(n)=1}^{N_b} \prod_{p=1}^n (-1)^{a(p)} \hat{H}_{a(p),b(p)} | \alpha \rangle \\
&= J^n \langle \alpha | \sum_{S_n} \prod_{p=1}^{2, N_b} (-1)^{a(p)} \hat{H}_{a(p),b(p)} | \alpha \rangle; \tag{3.23}
\end{aligned}$$

$S_n$  determina a sequência de operadores

$$S_n = [a(n), b(n)], [a(n-1), b(n-1)], \dots, [a(1), b(1)] \quad , \tag{3.24}$$

na qual  $a(p) \in [1, 2]$  corresponde ao tipo de operador (1  $\rightarrow$  diagonal; 2  $\rightarrow$  não-diagonal),  $b(p) \in [1, N_b]$  é o índice da ligação e  $p \in [1, n]$  é o índice referente à expansão de ordem  $n$ . Como visto na Eq. 3.23 o número total de linhas de operador diferentes é  $(2N_b)^n$ , que é bem grande para tamanho de sistema grande ( $N_b$  grande) ou para ordem de expansão grande ( $n$  grande).

Utilizando a notação das Eqs. (3.23 e 3.24), o peso  $W(\sigma, n)$  para uma configuração ( $\sigma$ ) é dado por:

$$\begin{aligned}
W(\sigma, n) &= \frac{(-\beta J)^n}{n!} \langle \alpha_\sigma | \prod_{p=n}^1 (-1)^{a(p)} \hat{H}_{a(p),b(p)} | \alpha_\sigma \rangle \\
&= \frac{(\beta J)^n}{n!} (-1)^{n_{H_2}} \\
&\quad \langle \alpha_\sigma | \hat{H}_{a(n),b(n)} \hat{H}_{a(n-1),b(n-1)} \dots \hat{H}_{a(1),b(1)} | \alpha_\sigma \rangle, \tag{3.25}
\end{aligned}$$

na qual  $n_{H_2}$  é o número de operadores não-diagonais na sequência de operadores. Como no caso clássico, o peso de qualquer configuração Eq (3.25) deve ser positivo para que a amostragem de Monte Carlo seja usada. O valor de  $\epsilon$  garante que o produto dos valores diagonais contribuam positivamente para o peso, entretando um maior cuidado deve ser dado aos termos não diagonais no caso de interações antiferromagnéticas. Neste caso vemos que cada aplicação do operador não-diagonal  $H_{2,b(p)}$  muda o estado da base  $H_{2,b(1)} | \alpha_\sigma \rangle = | \alpha'_\sigma \rangle$ . Em uma rede *bipartida* é necessário um número par de operadores

para que o estado modificado  $\sigma'$  seja o mesmo que o inicial  $\sigma$  e assim produza elementos que contribuem para função de partição  $\langle \alpha_\sigma | \alpha'_\sigma \rangle = \delta(\sigma, \sigma')$ . Desta forma  $n_{H_2}$  garante que o peso 3.25 seja positivo. Entretanto, se a rede é *não-bipartida* (por exemplo, rede triangular), podemos utilizar o operador não-diagonal um número ímpar de vezes e ainda trazer o sistema de volta ao estado inicial devido a existência da frustração geométrica. Neste caso estaríamos enfrentando o *problema de sinal* [33]: algumas configurações terão peso negativo. Nesse capítulo apenas consideraremos sistemas nos quais esse problema não ocorre.

Um meio eficiente de implementar o algoritmo é utilizando sequências de tamanho fixo  $M$  que é um ponto de corte onde a expansão é truncada. O erro de truncamento é exponencialmente pequeno e  $M$  pode ser escolhido de forma que esse erro possa ser ignorado[34].

É conveniente introduzir um *operador identidade* denotado consistentemente com os índices  $a = b = 0$ ,

$$H_{0,0} = 1. \quad (3.26)$$

Desta forma, podemos avaliar a função de partição na qual um número fixo de  $M - n$  operadores identidade,  $H_{0,0}$ , são inseridos em cada sequência de operador com tamanho  $n < M$ . Considerando todas maneiras de inserir esses operadores, existem  $\binom{M}{n}$  sequências diferentes produzidas por essa inserção. Apesar dessas sequências serem diferentes, elas produzem a mesma contribuição na função de partição. Logo, um fator  $\binom{M}{n}^{-1}$  deve ser incluído em cada peso de forma a anular esse sobrepeso. Para simplificar a notação vamos considerar  $J = 1$ . O peso de uma configuração ( $\sigma$ ) no espaço de configuração convencional  $\sigma$  é dado por

$$W(\sigma) = \sum_{\langle S_{M,n} \rangle} \frac{(-\beta)^n (M-n)! n!}{n! M!} \langle \alpha_\sigma | \prod_{p=n}^1 H_{a(p),b(p)} | \alpha_\sigma \rangle, \quad (3.27)$$

na qual  $\langle S_{M,n} \rangle$  indica somas sobre sequências do tipo 3.24. Finalmente, o peso de uma configuração ( $\sigma, S_{M,n}$ ) no espaço extendido de configuração  $\sigma, S_{M,n}$  é dado por

$$W(\sigma, S_{M,n}) = \frac{(\beta)^n (M-n)!}{M!} \langle \alpha_\sigma | \prod_{p=n}^1 H_{a(p),b(p)} | \alpha_\sigma \rangle, \quad (3.28)$$

onde  $n$  denota o número de operadores de ligação na sequência  $S_{M,n}$ , isto é,  $n$  é o número de elementos onde  $[a_i, b_i] \neq [0, 0]$ .

O ponto de partida do algoritmo SSE em sistemas quânticos é, então, normalmente a

função de partição escrita como

$$Z = \sum_{\sigma} \sum_{S_{M,n}} \frac{(-\beta)^n (M-n)! n!}{n! M!} \langle \alpha_{\sigma} | \prod_{p=n}^1 H_{a(p),b(p)} | \alpha_{\sigma} \rangle. \quad (3.29)$$

No espaço de configuração  $\sigma, n$  as configurações SSE são sorteadas de acordo com probabilidade

$$P(\sigma, S_{M,n}) = \frac{W(\sigma, S_{M,n})}{Z} = \frac{(\beta)^n (M-n)!}{Z M!} \langle \alpha_{\sigma} | \prod_{p=n}^1 H_{a(p),b(p)} | \alpha_{\sigma} \rangle. \quad (3.30)$$

Novamente isso requer que todos os pesos sejam positivos, ou seja, a presença de termos negativos são referidos como *problema de sinal*.

Usando os operadores diagonais e não-diagonais e com a função de partição Eq. (3.29), é fácil provar que o valor esperado da energia por spin  $\langle e \rangle$  no caso quântico também é proporcional à ordem de expansão  $n$ , como no caso clássico Eq. (3.12):

$$\begin{aligned} \langle e \rangle &= -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} (\ln(Z)) & (3.31) \\ &= -\frac{1}{N} \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} (Z) \\ &= -\frac{1}{N} \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \left( \sum_{\sigma} \sum_{S_{M,n}} \frac{(-\beta)^n (M-n)! n!}{n! M!} \langle \alpha_{\sigma} | \prod_{p=n}^1 H_{a(p),b(p)} | \alpha_{\sigma} \rangle \right) \\ &= -\frac{1}{N\beta} \left( \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} \sum_{S_{M,n}} n \cdot \frac{(-\beta)^n (M-n)! n!}{n! M!} \langle \alpha_{\sigma} | \prod_{p=n}^1 H_{a(p),b(p)} | \alpha_{\sigma} \rangle \right) \\ &= -\frac{1}{N\beta} \left( \sum_{\sigma} \sum_{S_{M,n}} n P(\sigma, S_{M,n}) \right) \\ &= -\frac{1}{N\beta} \langle n \rangle, & (3.32) \end{aligned}$$

na qual  $N$  é o número de sítios e  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ .

### 3.4 Estados propagados

Dada a probabilidade de uma configuração no espaço de configurações  $\{\sigma, M\}$ , o passo genérico de um algoritmo de simulação de Monte Carlo é determinado pela probabilidade de aceitação que satisfaz o critério de balanço detalhado. Essa probabilidade é usada para gerar novas configurações. Nessa seção, as ilustrações e exemplos consideram os estados possíveis para spin  $\frac{1}{2}$ , mas essa representação pode ser facilmente adaptada para

spin de tamanho genéricos ou até mesmo para representar outros modelos quânticos. Existem duas representações usadas para descrever uma configuração SSE: a representação dos estados propagados (*propagated vertex representation*) e a representação de vértices encadeados (*linked vertex representation*) [37]. Tecnicamente falando, a diferença marcante entre essas duas representações é o modo como as informações dos spins  $\sigma$  e a sequência de operadores  $S_{M,n}$  são salvas na simulação de MC. Essas representações serão descritas nas seções a seguir.

### 3.4.1 Representação de estados propagados

Primeiramente, definimos os *estados propagados*:

$$|\alpha(p)\rangle = \hat{H}_{a(p)b(p)}|\alpha(p-1)\rangle, \quad (3.33)$$

onde subentende-se a configuração  $\sigma'$  de  $|\alpha(p)\rangle$

$$|\alpha(p)\rangle = |\dots, S_{i(b)}^z(p) \otimes S_{j(b)}^z(p), \dots\rangle \quad (3.34)$$

depende-se da configuração  $\sigma$  de  $|\alpha(p-1)\rangle$  antes da aplicação do operador  $\hat{H}_{a(p)b(p)}$

$$|\alpha(p-1)\rangle = |\dots, S_{i(b)}^z(p-1) \otimes S_{j(b)}^z(p-1), \dots\rangle, \quad (3.35)$$

onde  $S_{i(b)}^z(p)$  é um autovetor do spin no sítio  $i$  após  $p$  aplicações do operador  $\hat{H}_{a(p)b(p)}$ .

$|\alpha(p)\rangle$  representa dois spins conectados pela ligação  $b(p)$  com o estado  $(S_{i(b)}^z(p), S_{j(b)}^z(p))$ , gerado a partir do estado propagado anterior  $|\alpha(p-1)\rangle$  pelo operador de ligação  $H_{a(p)b(p)}$  na posição  $p$  da sequência de operadores  $S_{M,n}$ . Com essa definição, podemos reescrever o peso de uma configuração Eq. (3.28) na forma:

$$\begin{aligned} W(\alpha, S_{M,n}) &= \frac{\beta^n (M-n)!}{M!} \langle \alpha(0) | \prod_{p=M}^1 H_{a(p)b(p)} | \alpha(0) \rangle & (3.36) \\ &= \frac{\beta^n (M-n)!}{M!} \langle \alpha(0) | H_{a(M)b(M)} \cdot H_{a(M-1)b(M-1)} \cdots H_{a(2)b(2)} H_{a(1)b(1)} | \alpha(0) \rangle \\ &= \frac{\beta^n (M-n)!}{M!} \langle \alpha(0) | H_{a(M)b(M)} \cdot H_{a(M-1)b(M-1)} \cdots H_{a(2)b(2)} | \alpha(1) \rangle \\ &= \frac{\beta^n (M-n)!}{M!} \langle \alpha(0) | H_{a(M)b(M)} \cdot H_{a(M-1)b(M-1)} \cdots | \alpha(2) \rangle \\ &\quad \vdots \\ &= \frac{\beta^n (M-n)!}{M!} \langle \alpha(0) | H_{a(M)b(M)} | \alpha(M-1) \rangle \\ &= \frac{\beta^n (M-n)!}{M!} \langle \alpha(0) | \alpha(M) \rangle, \end{aligned} \quad (3.37)$$

na qual  $\alpha(0)$  está em uma configuração específica  $\sigma$ . O estado propagado  $|\alpha(M)\rangle$  é o estado obtido após a aplicação sucessiva de todos operadores da sequência  $S_{M,n}$ . Se esse estado for diferente de  $|\alpha(0)\rangle$  o peso será nulo. Desta forma percebe-se que as configurações que têm peso diferente de zero são aquelas nas quais o estado inicial  $|\alpha(0)\rangle$  deve ser propagado de forma a retornar ao mesmo estado após a  $M$ -ésima aplicação de operador  $H_{a,b}$ , isto é,

$$\langle\alpha(0)|H_{a(M)b(M)}|\alpha(M-1)\rangle = \langle\alpha(0)|\alpha(M)\rangle = \langle\alpha(0)|\alpha(0)\rangle = 1. \quad (3.38)$$

Os operadores diagonais não alteram a configuração do estado de  $|\alpha\rangle$ . Considere, por exemplo, a rede da figura 3.2 e o primeiro operador da sequência sendo diagonal e atuando nos estado  $\sigma$  tal que o estado para o sítio de índice 6 é dado pelo spin  $|+\rangle$  e o spin de índice 10 está no estado  $|-\rangle$ , cujo índice de ligação  $b$  é 22. Logo:

$$|\alpha(0)\rangle = |\dots S_i^z(22) \otimes S_j^z(22) \dots\rangle \quad (3.39)$$

$$= |\dots S_6^z \otimes S_{10}^z \dots\rangle \quad (3.40)$$

$$= |\dots + \otimes - \dots\rangle, \quad (3.41)$$

$$\hat{H}_{a(1),b(1)} = \hat{H}_{1,22}. \quad (3.42)$$

Aplicando a Eq. (3.19) obtemos

$$\hat{H}_{a(1),b(1)}|\alpha(0)\rangle = (\epsilon + \Delta)|\alpha(1)\rangle = (\epsilon + \Delta)|\dots + \otimes - \dots\rangle. \quad (3.43)$$

Portanto, se  $H_{a(p)b(p)}$  for diagonal na posição  $p$  da sequência de operadores  $S_{M,n}$ , o estado propagado  $|\alpha(p)\rangle$  permanece o mesmo:

$$|\alpha(0)\rangle = H_{a(p)b(p)}|\alpha(p-1)\rangle \propto |\alpha(p-1)\rangle. \quad (3.44)$$

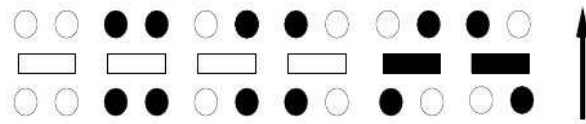


Figura 3.3: Os seis vértices possíveis: os círculos sólidos representam spin- $\uparrow$  e os círculos abertos representam spin- $\downarrow$ ; barras horizontais sólidas representam o operador não diagonal  $H_{2,b}$  e barras horizontais abertas representam o operador diagonal  $H_{1,b}$ . A seta indica a direção da propagação.

Para o nosso "toy model", o modelo XXZ com spin-1/2 e interações antiferromagnéticas, observa-se dos elementos de matriz  $\langle\alpha(p)|H_{a(p)b(p)}\alpha(p-1)\rangle$ , apenas seis são diferentes e não nulos (desconsiderando o caso no qual  $H_{a(p)b(p)} = H_{0,0}$ ). Estes são fáceis de calcular a partir do Hamiltoniano Eq. (3.16). A representação gráfica desses elementos pode ser

vista na figura 3.3.

Para avaliar estes elementos é necessário aplicar o operador diagonal  $H_{1,b}$  Eq. (3.19) e o operador não diagonal  $H_{2,b}$  Eq. (3.20) nas possíveis configurações de spin  $|\alpha(p-1)\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle, |\uparrow, \uparrow\rangle, \dots, |\downarrow, \uparrow\rangle$  os resultados estão listados na tabela 3.1.

Elemento de Matriz	Valor
$\langle \downarrow, \downarrow   H_{1,b}   \downarrow, \downarrow \rangle$	$C - \frac{\Delta}{4} - \frac{h}{2dJ}$
$\langle \uparrow, \uparrow   H_{1,b}   \uparrow, \uparrow \rangle$	$C - \frac{\Delta}{4} + \frac{h}{2dJ}$
$\langle \uparrow, \downarrow   H_{1,b}   \uparrow, \downarrow \rangle$	$C + \frac{\Delta}{4}$
$\langle \downarrow, \uparrow   H_{1,b}   \downarrow, \uparrow \rangle$	$C + \frac{\Delta}{4}$
$\langle \downarrow, \uparrow   H_{2,b}   \uparrow, \downarrow \rangle$	$\frac{1}{2}$
$\langle \uparrow, \downarrow   H_{2,b}   \downarrow, \uparrow \rangle$	$\frac{1}{2}$

Tabela 3.1: Os seis elementos de matriz diferentes para o modelo XXZ com spin-1/2 e interações antiferromagnéticas

A Fig. 3.4 é uma ilustração gráfica do estado propagado na representação de uma configuração SSE para uma cadeia de oito sítios. As notações dos estados de spin e tipos de operadores são as mesma que na Fig 3.3. A linha  $p$  da figura representa o estado propagado  $|\alpha(p)\rangle$  e cada barra representa um operador  $\hat{H}_{a(p),b(p)}$  da sequência de operadores. O operador  $\hat{H}_{a(p),b(p)}$  separa os estados  $|\alpha(p)\rangle$  e  $|\alpha(p-1)\rangle$ , como existe apenas um operador para cada índice  $p$  vamos ter no máximo um operador separando cada linha de estados. Neste caso, com expansão de corte  $M = 13$ , existem  $n - 8$  operadores de ligação ( $[a_i, b_i] \neq [0, 0]$ ) e  $M - n = 5$  operadores identidade ( $[a_i, b_i] = [0, 0]$ ). O último corresponde ao espaço vazio entre os estados propagados.

Os estados propagados  $|\alpha(p)\rangle, p = 1, 2, \dots, M$  na Fig. 3.4 podem ser obtidos a partir da configuração inicial  $|\alpha(0)\rangle$

$$|\alpha(p)\rangle = \prod_{i=p}^1 H_{a(i),b(i)} |\alpha(0)\rangle. \quad (3.45)$$

A partir da representação do estado propagado é fácil ver as condições periódicas de contorno na direção da propagação:  $|\alpha(M)\rangle = |\alpha(0)\rangle$ , que deve ser obedecida por qualquer configuração contribuinte no espaço de configurações  $\alpha, S_{M,n}$ . Se a rede é bipartida, as condições periódicas de contorno no "tempo imaginário" (direção de propagação) implicam que: ou cada spin não é alterado de maneira alguma, ou deve ser alterado um número par de vezes durante a propagação de  $p = 1$  a  $p = M$ . A rede bipartida por sua vez, implica que um número par de operadores não-diagonais ( $[a(p), b(p)] = [2, b]$ ) é necessário na sequência de operadores  $S_{M,n}$ .



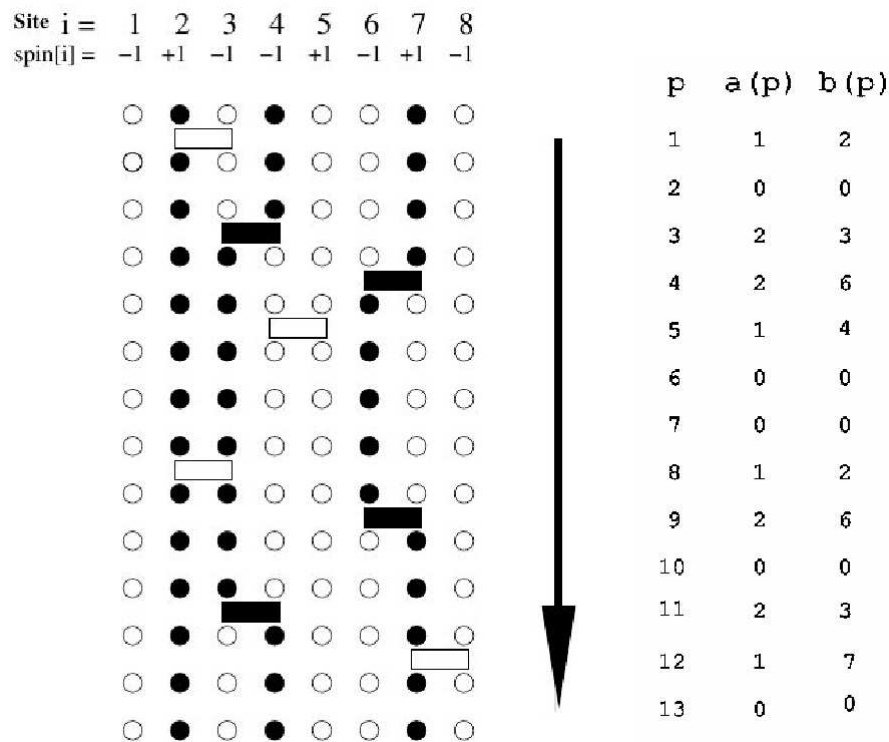


Figura 3.4: Representação de estados propagados para uma cadeia unidimensional com corte de expansão  $M = 13$ ,  $n = 8$  e  $M - n = 5$ . Os círculos sólidos representam spin- $\uparrow$  e os círculos abertos representam spin- $\downarrow$ ; barras horizontais sólidas representam o operador não diagonal  $H_{2,b}$  e barras horizontais abertas representam o operador diagonal  $H_{1,b}$  e espaços vazios entre dois estados sucessivos propagados representa um operador identidade  $[a_i, b_i] = [0, 0]$  "agindo" entre esses estados; o índice de ligação  $b$  indica que a ligação  $b$  é conectada aos sítios  $b$  e  $b + 1$ .

### 3.4.2 Representação de vértices encadeados

O produto dos elementos de matriz da Eq. (3.33) pode ser representado por uma rede de  $n$  vértices, no qual  $n$  é o número de operadores de ligação  $[a(p), b(p)] \neq [0, 0]$  na sequência de operadores  $S_{M,n}$ . A representação de estados propagados da configuração SSE mostra explicitamente o estado propagado para todo índice  $p$ , entretanto, com a representação de vértices encadeados, apenas a mudança dos estados é representada pelos vértices. Na representação de vértices encadeados, um operador é representado por um vértice com quatro pernas e cada perna tem um estado de spin correspondente. O operador age em dois spins de "entrada" (duas pernas de "entrada") e o resultado da operação são dois spins de "saída" (duas pernas de "saída"). Nessa representação é possível considerar as condições periódicas de contorno dos estados propagados, ou seja, os elos podem passar através de  $p = 0$ .

A Fig 3.5 é a representação de vértices encadeados para a configuração SSE da Fig 3.4. Aqui as colunas dos spins fixos foram substituídas por operações consecutivas na

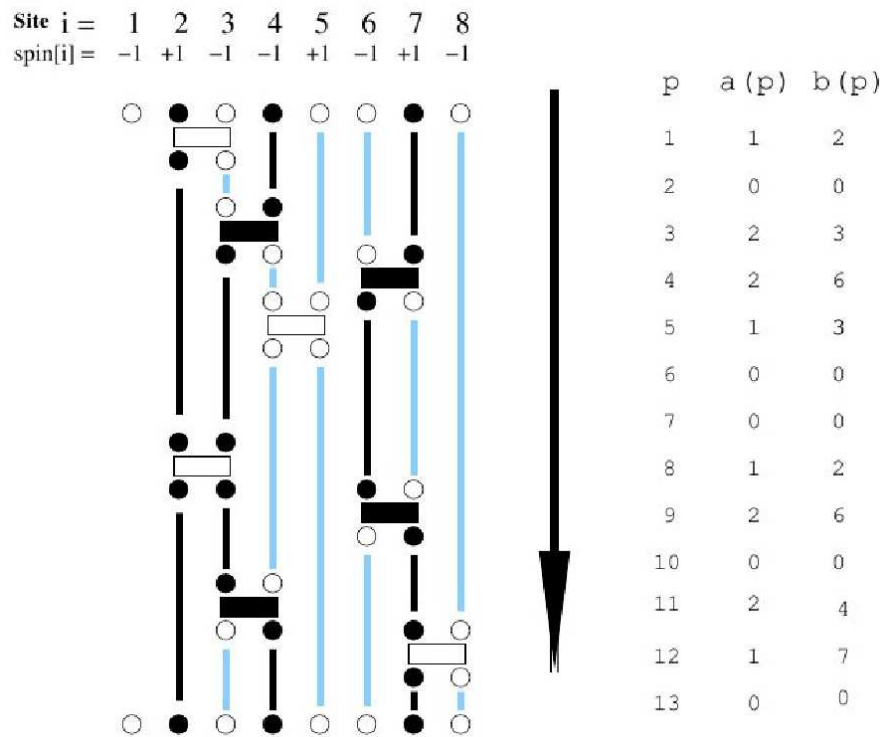


Figura 3.5: Representação de vértices encadeados para a configuração SSE da Fig 3.4, a configuração SSE para uma cadeia unidimensional com expansão de corte  $M = 13$ ,  $n = 8$  e  $M - n = 5$ . Os círculos sólidos e abertos, barras horizontais sólidas e abertas têm o mesmo significado que na Fig 3.4, entretanto foi removido todos estados de spin propagados que possuem spins fixos entre operações consecutivas. Linhas verticais indicam valores de spin constantes. A seta indica a direção de propagação.

representação de estados propagados por linhas verticais, representando o elo bidirecional entre as pernas de vértices consecutivos.

As pernas de vértices dos seis vértices mostrados na Fig 3.3 são mostrados na Fig 3.6. Para a mesma configuração SSE ilustrada na Fig 3.4 com a representação de estados propagados ou na Fig 3.5 com a representação de vértices encadeados.

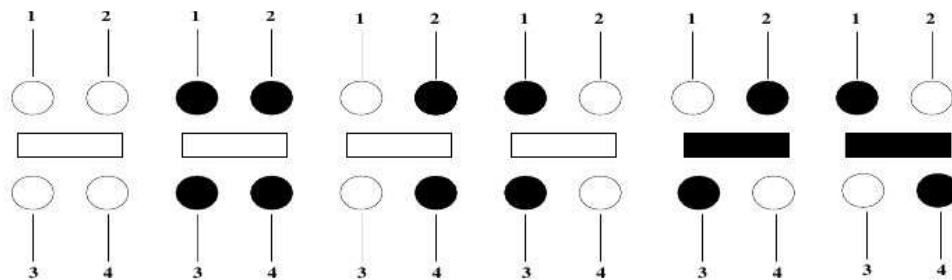


Figura 3.6: Os seis vértices com suas pernas de vértices correspondentes

## 3.5 Balanço detalhado

Nessa seção são discutidas como as configurações são alteradas de acordo com a distribuição de probabilidade  $P(\sigma, S_{M,n}) = \frac{W(\sigma, S_{M,n})}{Z}$  no espaço de configuração  $\sigma, S_{M,n}$  com a representação discutida na seção anterior. Uma simulação de Monte Carlo é normalmente iniciada com alguma configuração arbitrária permitida e ao realizarmos alterações geramos uma cadeia de Markov de configurações. A nova configuração será aceita ou rejeitada de acordo com as probabilidades escolhidas, tal que o balanço detalhado seja satisfeito. Isto é:

$$W(A)P_t(A \rightarrow B) = W(B)P_t(B \rightarrow A), \quad (3.46)$$

com

$$\underbrace{P_t(A \rightarrow B)} = \underbrace{P_e(A \rightarrow B)} \times \underbrace{P_a(A \rightarrow B)}, \quad (3.47)$$

a probabilidade de transição a probabilidade de escolha a probabilidade de aceitação.

Assumimos que  $P_t(A \rightarrow B) = P_t(B \rightarrow A)$ , isto é, a probabilidade de fazer uma tentativa da configuração atual  $A$  para uma nova configuração  $B$  é igual à probabilidade de fazer a transição oposta. A probabilidade para aceitar uma mudança da configuração  $A$  para a nova configuração teste  $B$  pode ser obtida pelo algoritmo de Metrópolis [42],

$$P_a(A \rightarrow B) = \min\left(\frac{W(B)}{W(A)}, 1\right). \quad (3.48)$$

Todavia, se  $P_e(A \rightarrow B) \neq P_e(B \rightarrow A)$ , então, a probabilidade de aceitação é modificada para contrabalancear essa tendência. Em simulações de Monte Carlo clássico do modelo de Ising, por exemplo, a condição  $P_e(A \rightarrow B) = P_e(B \rightarrow A)$  geralmente se mantém, porque em uma rede de  $N_s$  spins, a probabilidade de selecionar aleatoriamente um spin  $i$  para alterar é sempre a mesma ( $P_e(i) = \frac{1}{N_s}$ ). Infelizmente, esse não é sempre o caso em uma simulação de Monte Carlo Quântico (MCQ).

No método SSE, dois tipos de alteração são usados: alteração diagonal (*diagonal update*) e a alteração de laço (*loop update*) [37]. A alteração diagonal é realizada na representação de estados propagados e a alteração de laço por sua vez utiliza a representação de vértices encadeados.

A simulação normalmente começa a partir de uma configuração permitida arbitrária

$(\sigma, S_{M,n})$  - uma configuração de spin aleatória

$$\text{spin}[i] = 1, -1, -1, -1, \dots, 1, \quad i = 1, 2, \dots, N_s, \quad (3.49)$$

e uma sequência de operadores vazia  $S_{M,n} = \{a(p), b(p) \mid a(p) = b(p) = 0 \quad \forall p \in [1, M]\}$  com comprimento  $M$  arbitrário.

### 3.5.1 Alteração diagonal

Alterações diagonais são do tipo  $[0, 0]_p \leftrightarrow [1, b]_p$ , ou seja, são dadas pela substituição de um operador identidade ( $a = 0, b = 0$ ) por um operador diagonal ( $a = 1$ ) em uma ligação de índice  $b$ . Essas são usadas para alterar o número de operadores de ligação ( $[a_i, b_i] \neq [0, 0]$ ) na sequência de operadores  $S_{M,n}$ .

Se a sequência de operadores está vazia, ou seja, está composta apenas por operadores identidade ( $[a_i, b_i] = [0, 0] \quad \forall i \in [1, M]$ ), então a probabilidade de aceitação para inserir um operador diagonal  $P_a([0, 0]_p \rightarrow [1, b]_p)$  pode ser calculada a partir da equação de balanço detalhado, Eq. (3.46), como

$$\begin{aligned} W([0, 0]_p) P_e([0, 0]_p \rightarrow [1, b]_p) P_a([0, 0]_p \rightarrow [1, b]_p) = \\ W([1, b]_p) P_e([1, b]_p \rightarrow [0, 0]_p) P_a([1, b]_p \rightarrow [0, 0]_p). \end{aligned} \quad (3.50)$$

Este é o caso no qual as probabilidades de escolha entre duas configurações são diferentes, isto é,  $P_e(A \rightarrow B) \neq P_e(B \rightarrow A)$ . Observa-se que  $P_e([0, 0]_p \rightarrow [1, b]_p) = \frac{1}{N_b}$  ao levar em consideração que existem  $N_b$  ligações  $b$  possíveis para a escolha de inserção do operador diagonal ( $[0, 0]_p \rightarrow [1, b]_p$ ), entretanto,  $P_e([1, b]_p \rightarrow [0, 0]_p) = 1$ , pois existe apenas uma maneira de remover o operador diagonal  $[1, b]_p \rightarrow [0, 0]_p$  quando a ligação  $b$  é sorteada. Logo as probabilidades de escolha seguem a razão,

$$\frac{P_e([1, b]_p \rightarrow [0, 0]_p)}{P_e([0, 0]_p \rightarrow [1, b]_p)} = N_b. \quad (3.51)$$

A probabilidade de aceitação  $P_a([0, 0]_p \rightarrow [1, b]_p)$  é calculada pela substituição dos

pesos da antiga e da nova configuração. Substituindo a Eq. (3.36) na Eq. (3.50),

$$\begin{aligned}
P_a([0,0]_p \rightarrow [1,b]_p) &= \min \left( \frac{W([1,b]_p)}{W([0,0]_p)} \cdot \frac{P_e([1,b]_p \rightarrow [0,0]_p)}{P_e([0,0]_p \rightarrow [1,b]_p)}, 1 \right) \\
&= \min \left( \frac{W([1,b]_p)}{W([0,0]_p)} \cdot N_b, 1 \right) \\
&= \min \left( \frac{\frac{\beta^{n+1} \cdot (M-(n+1))!}{M!}}{\frac{\beta^n \cdot (M-n)!}{M!}} \cdot \frac{\langle \alpha | \prod_{p=M}^1 H_{a_p, b_p} | \alpha \rangle \cdot N_b}{\langle \alpha | \prod_{p=M}^1 H_{a_p, b_p} | \alpha \rangle}, 1 \right) \\
&= \min \left( \frac{\beta \cdot \langle \alpha(p+1) | H_{1,0} | \alpha(p) \rangle \cdot N_b}{(M-n) \cdot \underbrace{\langle \alpha(p+1) | H_{0,0} | \alpha(p) \rangle}_{=1}}, 1 \right) \\
&= \min \left( \frac{\beta \cdot \langle \alpha(p+1) | H_{1,0} | \alpha(p) \rangle \cdot N_b}{(M-n)}, 1 \right) \tag{3.52}
\end{aligned}$$

O caso  $H_{a(p),b(p)} = H_{1,b(p)}$  representa um operador diagonal na ligação  $b$  na posição  $p$  da sequência de operadores. De forma similar à calculada, acima pode-se mostrar que a probabilidade de aceitação de remover tal operador diagonal é dada por:

$$P_t([1,b]_p \rightarrow [0,0]_p) = \min \left( \frac{(M-n+1)}{\beta \cdot \langle \alpha | H_{1,b} | \alpha \rangle \cdot N_b}, 1 \right). \tag{3.53}$$

Nota-se que  $N_b$  no denominador reflete o fato que existe apenas uma única posição para escolher a remoção  $[1,b]_p \rightarrow [0,0]_p$  para uma dada ligação  $b$ .

Alterações diagonais são realizadas consecutivamente para toda posição  $p = 1, 2, \dots, M$ , e quando os operadores não-diagonais  $H_{2,b(p)}$  são encontrados, o estado  $|\alpha(p-1)\rangle$  é apenas propagado sem alterar o tipo de operador. Devido à periodicidade na direção de propagação, todo spin pode apenas ser alterado um número par de vezes (incluindo zero, veja Eq. (3.25)). Desta forma, quando completamos a alteração diagonal até a última posição  $p = M$  na sequência de operadores, os spins são propagados de volta ao estado original,  $|\alpha(M)\rangle = |\alpha(0)\rangle$ .

### 3.5.2 Alteração pelo operador de laço (Operator Loop Update)

A atualização das configurações por meio do operador diagonal não altera o número de operadores não-diagonais e sequer pode alterar as configurações de spin ao longo do caminho dos estados propagados:  $(|\alpha(0)\rangle, |\alpha(1)\rangle, \dots, |\alpha(M-1)\rangle, |\alpha(0)\rangle)$ . A alteração por operador de laço (*operator loop update*)[37] é responsável por esses tipos de mudanças de configuração. A alteração por operador de laço muda o tipo dos operadores de ligação, de

diagonal para não diagonal ou no sentido inverso. Essa mudança pode ocorrer em vários elementos da sequência de operadores sem alterar o número total de operadores, isto é, a alteração por operador laço é realizada com  $n$  fixo.

A ideia da alteração por operador laço é construir um caminho fechado conectando as pernas dos vértices. Entre vértices diferentes, cada perna de vértice é ligada a uma perna de outro vértice e essas formam um segmento de um caminho. Dentro de um vértice, temos uma perna como entrada e outra como saída. Essa parte também é um segmento de um caminho. Tal caminho é estendido repetidamente com esses dois tipos de segmentos até que retornemos à perna original e um caminho fechado (laço) é eventualmente formado. Uma vez que o caminho é fechado, altera-se todos spins pelo qual o laço é formado.

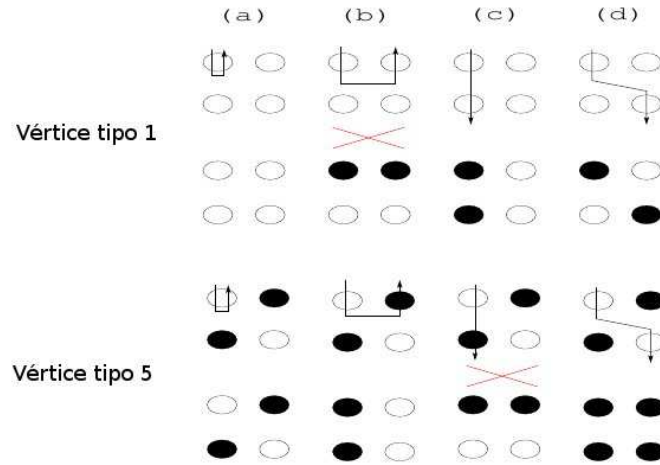


Figura 3.7: Todos os quatro caminhos possíveis aplicados nos vértices dos tipos 1 e 5, nos quais a perna de entrada é a perna esquerda superior (perna 1). As setas indicam a direção de propagação. Os vértices alterados, com spins na entrada e saída alterados, também são mostrados. Note que os dois casos marcados com um "X" são proibidos, pois eles violam a conservação de magnetização durante a propagação. Os quatro processos diferentes são referidos como (a) "Quicar"(Bounce), (b) "Trocar e Voltar", (c) "Continuar reto" e (d) "Trocar e Continuar"

Para construir um operador de laço, uma das  $4 \times n$  pernas de vértices é selecionada aleatoriamente como perna inicial de entrada. Uma das quatro pernas pertencentes ao mesmo vértice é escolhida como perna de saída: tanto o spin de entrada quanto o de saída são alterados. Em princípio, existem quatro saídas quando a entrada é fixada. Na verdade devido à conservação da magnetização total -  $[S_{tot}^z, H] = 0$ , existem apenas três outras possíveis saídas. Na figura 3.7 vemos que o processo *b*) aplicado ao vértice do tipo 1 e o processo *c*) aplicado ao vértice do tipo 5 alteram a magnetização total entre estados propagados  $|\alpha(p)\rangle$  e  $|\alpha(p-1)\rangle$  e são portanto, processos proibidos. Exemplos de como

vértices mudam nos quatro processos pode ser visto na Fig 3.7. A probabilidade de saída de uma certa perna, dada a entrada, é relacionada com a matriz de elementos da tabela 3.1. A forma explícita de tal probabilidade, que desempenha papel crucial na eficiência da simulação, é o tópico principal da próxima seção.

Se as pernas de entrada e saída estão em sítios diferentes ("Trocar e Voltar" e "Trocar e Continuar"), o tipo do operador naquele vértice irá mudar: a parte superior na figura 3.7, para o vértice do tipo 1, depois de "Trocar e Continuar", o operador muda de diagonal para não diagonal. Na parte inferior, para o vértice do tipo 5, o operador muda o tipo de não-diagonal para diagonal em ambos processos "Trocar e Continuar" e "Trocar e Voltar". Note que o processo de "Quicar" na figura 3.7 é permitido para ambos os vértices (tipo 1 e 5) e deixa o vértice inalterado.

Uma alteração por laço pode afetar um número muito grande de operadores. O número de laços a ser construídos pode ser determinado de duas formas: (i) Caso a construção de um laço seja determinística, podemos seguir o algoritmo de cluster de *Swendsen-Wang* para o modelo clássico de Ising [43], no sentido que podemos construir todos os laços e depois trocar os valores de spin de cada um deles com probabilidade  $\frac{1}{2}$ , ou seja, metade dos laços contruídos são utilizados para gerar uma nova configuração; (ii) Ou de forma mais geral podemos seguir o algoritmo de cluster de *Wolff* [44], no qual construímos um certo número de laços,  $N_l$ , e cada laço (cluster) é construído aleatoriamente (com diferentes pontos de entradas escolhidos aleatoriamente) e os valores de spin de cada um deles são trocados com probabilidade 1, ou seja, todos  $N_l$  laços construídos são utilizados para gerar uma nova configuração. O último, por ser mais geral, será exemplificado aqui. Utilizando a representação de vértices encadeados, o procedimento de construção de um laço pode ser descrito como:

1. Escolha uma perna  $v_0$  das  $4 * n$  pernas possíveis em uma sequência de  $n$  vértices (operadores).
2. Escolha uma perna de saída  $v_1$  das 4 pernas possíveis de saída com uma certa probabilidade  $p(v_0, v_1)$  (uma das pernas de saída não preserva a magnetização logo é proibida).
3. Veja a qual perna de vértice a perna  $v_1$  está ligada e defina esta como a nova perna de entrada.
4. Repita os dois últimos passos até que o vértice inicial seja alcançado.

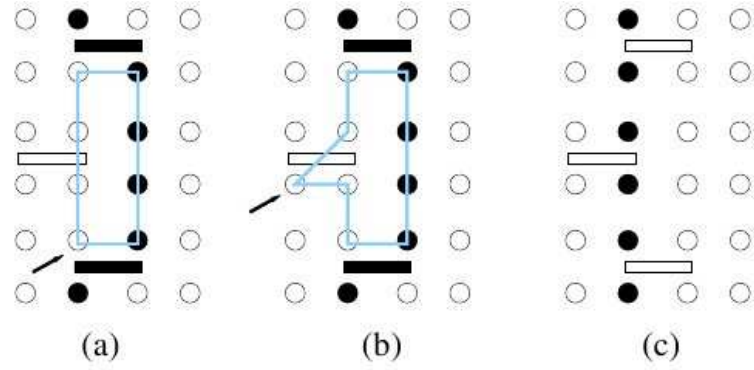


Figura 3.8: Duas maneiras de fechar um operador de laço. A perna de entrada original do laço em (a) e (b) são as pernas apontadas por setas. Em (a) o último segmento de um laço conecta os vértices iniciais e finais (correspondentes ao caso  $v_1=v_0$ ), o spin inicial é alterado. Em (b) o último segmento do laço está dentro do vértice inicial (correspondendo a  $v_2=v_0$ ) e a perna de entrada original é trocada duas vezes, permanecendo então inalterado. Tanto o operador em (a) quanto em (b) produz a mesma configuração final (c).

A probabilidade  $p(v_0, v_1)$  pode depender da perna de entrada e saída e do tipo do vértice e será discutida na próxima seção.

A figura 3.9 é crucial para o entendimento do esquema de alteração por laço. Para facilitar o entendimento vamos representar a sequência de operadores  $S_{M,n}$  pelo vetor:

$$opstring[p] = (a(p) \bmod 2) + 2b(p), \quad (3.54)$$

no qual  $p$  é o índice do operador,  $a(p)$  é o tipo do operador (0 unitário, 1 diagonal e 2 não diagonal) e  $b(p)$  é o índice da ligação entre spins. O estado inicial dos spins  $|\alpha(0)\rangle$  é dado pelo vetor:

$$spin = [-1, +1, -1, -1, +1, -1, +1, -1] \quad |\alpha(0)\rangle = | - + - - + - + - \rangle. \quad (3.55)$$

Nessa figura podemos ver claramente como um operador de laço é construído e como esse laço mudará a configuração SSE. Cada operador é representado por um vértice. Os vértices na posição  $p = 1; 8$  mudam seu tipo de diagonal ( $a(p) = 1$ ) para não diagonal ( $a(p) = 2$ ). Os vértices na posição  $p = 3; 11$  mudam seu tipo de não-diagonal ( $a(p) = 2$ ) para não diagonal ( $a(p) = 1$ ). Os vértices restantes mantêm-se inalterados.



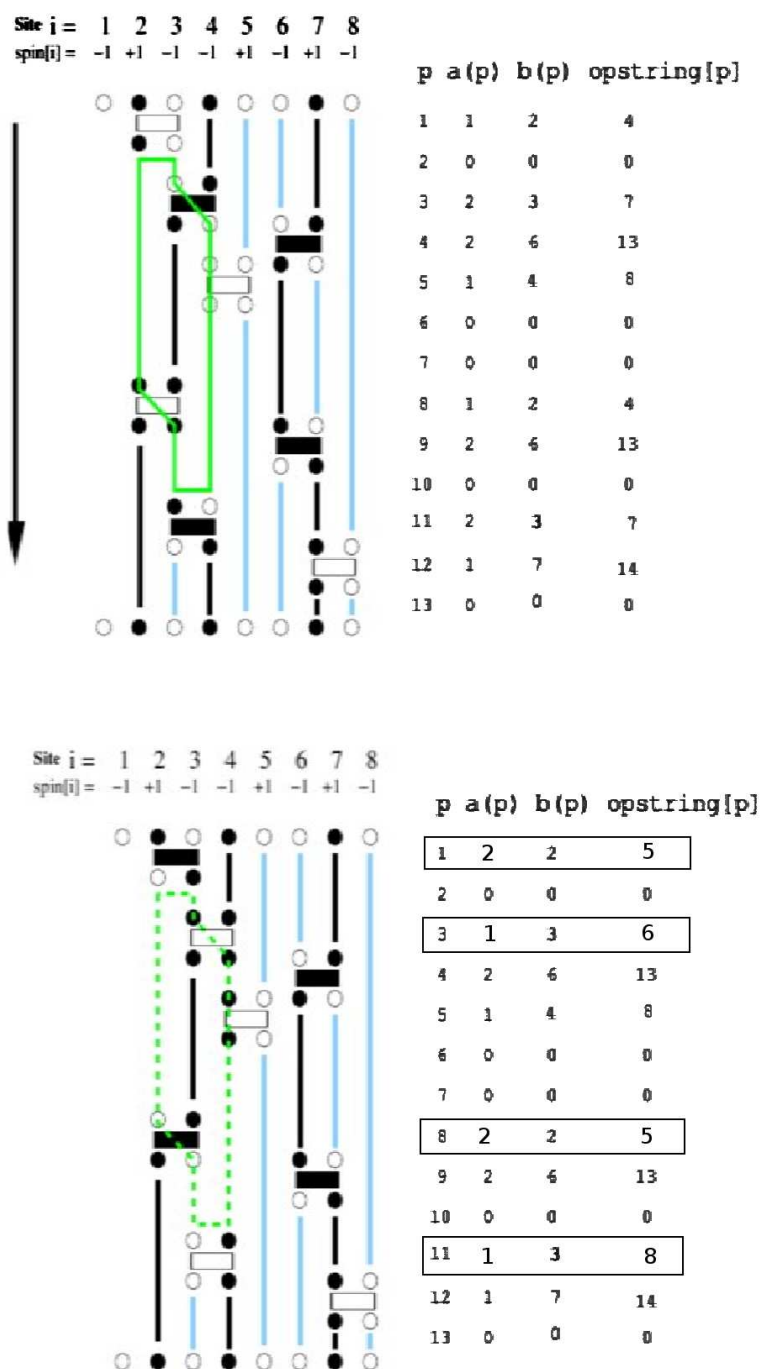


Figura 3.9: Configuração SSE representação de estados propagados antes e depois de uma operação de laço. Acima está representado o caminho do laço antes da alteração de spin, abaixo está representado a configuração alterada quando trocamos todos spins nas pernas dos vértices utilizadas nesse laço. Depois da troca de spin, em alguns vértices, o tipo de operador muda: para vértices na posição  $p = 1$  e  $p = 8$ , o operador muda de diagonal para não-diagonal, enquanto para vértices na posição  $p = 3$  e  $p = 11$  os operadores mudam de não-diagonal para diagonal. Existem também vértices, os quais seus operadores permanecem inalterados após a troca de spin, como aquele em  $p = 5$ .

Deve-se ter atenção ao modo como o laço se fecha. Existem duas formas de fechar o laço: i) A perna inicial  $v_0$  é a mesma perna que conecta o último vértice e neste caso o spin desta perna será alterado; ii) A perna inicial  $v_0$  é diferente da perna que conecta o último vértice, e portanto  $v_0$  não é alterado. As formas possíveis de fechar um laço podem ser vistas na figura 3.8. Os spins no estado  $|\alpha(p)\rangle$  ( $p \in [0, M]$ ) que não foram afetados por nenhum dos operadores na sequência de operadores  $S_{M,n}$  são denotados como spins "livres". Tais spins podem ser trocados com probabilidade  $\frac{1}{2}$  já que não aparecem na função peso. A troca do valor desses spins livres permite gerar uma nova configuração com magnetização total diferente. Isso é possível porque a restrição sobre mudança de magnetização se aplica apenas à sequência de operadores, ou seja, se aplica a spins nos quais existe algum operador agindo sobre eles. Estes spins não podem ser livremente alterados devido à restrição  $\langle(0)|\alpha(M)\rangle > 0$  que restringe as sequências de operadores possíveis. Os spins livres podem ser arbitrariamente alterados pois não são submetidos a tal restrição. Como visto na Eq. (3.32), a energia é proporcional à média do valor de  $n$ , o número de operadores Hamiltonianos na sequência  $S_{M,n}$ :

$$\langle n \rangle = eN\beta. \quad (3.56)$$

Vemos que  $\langle n \rangle$  cresce linearmente com o inverso da temperatura  $\beta$ , desta forma, spins livres só aparecem com frequência em temperaturas altas.

Com isso em mente, um Passo de Monte Carlo (PMC) pode então ser definido como :

1. Faça uma varredura de alteração diagonal em todas posições possíveis  $p$  em  $S_{M,n}$ .
2. Construa  $N_l$  operadores de laço.
3. Trace o estado dos spins desses  $N_l$  laços (mapeando para um nova sequência de operadores  $S_{M,n}$  e uma nova configuração de spin  $|\alpha\rangle$ )
4. Troque o estado de cada um dos spins livres com probabilidade  $\frac{1}{2}$ .

O valor de  $N_l$  deve ser gravado e ajustado durante a fase de equilíbrio da simulação para garantir que nós visitamos uma fração significativa de vértices. Tipicamente na fase de equilibração da simulação, determina-se  $N_l$  tal que a média cumulativa do comprimento do laço (o número de vértices visitados) em uma simulação de Monte Carlo Quântico (MCQ) seja menor ou igual a  $10\langle n \rangle$  em uma sequência de tamanho variável ou  $10\langle M \rangle$  em uma sequência de tamanho fixo  $M$ .

## 3.6 Soluções para equações de laço dirigido

A eficiência do programa SSE depende, dentre outros fatores, do modo como é escolhida a perna de saída de um vértice dada uma perna de entrada. Para a maioria dos casos existem várias soluções possíveis que satisfazem a condição de balanço detalhado, porém não há como definir a priori a solução mais eficiente. Cada solução pode ser indicada por uma matrix estocástica  $a_{ij}$ , que define a probabilidade de transição dada uma perna de entrada  $i$  e uma perna de saída  $j$ . Algumas dessas soluções são descritas a seguir na seguinte ordem: Primeiro começaremos com a primeira solução sugerida por Sandvik[37] que é a solução de banho térmico aplicada ao nosso "toy model". Dentre as soluções mostradas é a solução mais ineficiente, porém a mais simples. Depois mostraremos a origem das equações de laço dirigido a partir da equação de balanço detalhado. Em outra seção, analisaremos as equações de laço dirigido na forma de uma matrix estocástica. Mostraremos depois a solução intuitivamente mais eficiente, a solução de "Quicagem" mínima. Finalmente mostramos a solução "localmente ótima", pela aplicação do teorema de Peskun[45, 46, 40] à matrix estocástica. Todas essas, são soluções particulares possíveis ao criar restrições (minimizáveis) na matrix estocástica que representa as equações de laço dirigido.

### 3.6.1 Banho térmico

Na versão original do operador de laço SSE [33], a probabilidade de selecionar uma perna de saída é dada como proporcional ao elemento de matrix correspondente na tabela 3.1, depois de alterar os spins de entrada e saída. Este é o esquema de *banho térmico* [39].

Considere a figura 3.7 por exemplo: temos dois tipos de vértices, 1 e 5. A perna de entrada em ambos vértices é a perna superior esquerda (1). A probabilidade de selecionar a perna inferior direita como saída para o vértice do tipo 1 é dada por:

$$P_{leg1 \rightarrow leg4} = \frac{\langle \downarrow \uparrow | H_{2,b} | \uparrow \downarrow \rangle}{\langle \downarrow \downarrow | H_{1,b} | \downarrow \downarrow \rangle + \langle \uparrow \downarrow | H_{1,b} | \uparrow \downarrow \rangle + \langle \downarrow \uparrow | H_{2,b} | \uparrow \downarrow \rangle}, \quad (3.57)$$

que é o processo "Quicar".

O vértice alterado ainda pertence ao tipo 5, e seu operador ligação permanece não-diagonal ( $H_{2,b} \rightarrow H_{2,b}$ ). Devido ao fato de que a perna de entrada e saída é a mesma, o estado do spin é trocado duas vezes permanecendo efetivamente inalterado.

Esse processo é normalmente indesejado na simulação. A razão é clara: depois do processo "Quicar", nada acontece no vértice. O tipo da ligação não muda ( $H_{2,b} \rightarrow H_{2,b}$ )

e nem os spins de entrada e saída. Logo depois desse processo ainda estamos na mesma configuração que antes, e dessa forma não podemos amostrar eficientemente o espaço de configuração  $\sigma, S_{M,n}$ . Infelizmente, no algoritmo de banho térmico, a probabilidade de aceitar esse processo é sempre finita. Essa volta para um estado anterior para realizar um novo caminho normalmente é definida como *backtracking*.

Elemento de Matriz	Valor
$\langle \downarrow, \downarrow   H_{1,b}   \downarrow, \downarrow \rangle$	0
$\langle \uparrow, \uparrow   H_{1,b}   \uparrow, \uparrow \rangle$	0
$\langle \uparrow, \downarrow   H_{1,b}   \uparrow, \downarrow \rangle$	$\frac{1}{2}$
$\langle \downarrow, \uparrow   H_{1,b}   \downarrow, \uparrow \rangle$	$\frac{1}{2}$
$\langle \downarrow, \uparrow   H_{2,b}   \uparrow, \downarrow \rangle$	$\frac{1}{2}$
$\langle \uparrow, \downarrow   H_{2,b}   \downarrow, \uparrow \rangle$	$\frac{1}{2}$

Tabela 3.2: Os 6 elementos de matriz diferentes para o modelo de Heisenberg com spin-1/2 e interações antiferromagnéticas.

Elemento de Matriz	Valor
$\langle \downarrow, \downarrow   H_{1,b}   \downarrow, \downarrow \rangle$	$\frac{1}{2}$
$\langle \uparrow, \uparrow   H_{1,b}   \uparrow, \uparrow \rangle$	$\frac{1}{2}$
$\langle \uparrow, \downarrow   H_{1,b}   \uparrow, \downarrow \rangle$	$\frac{1}{2}$
$\langle \downarrow, \uparrow   H_{1,b}   \downarrow, \uparrow \rangle$	$\frac{1}{2}$
$\langle \downarrow, \uparrow   H_{2,b}   \uparrow, \downarrow \rangle$	$\frac{1}{2}$
$\langle \uparrow, \downarrow   H_{2,b}   \downarrow, \uparrow \rangle$	$\frac{1}{2}$

Tabela 3.3: Os 6 elementos de matriz diferentes para o modelo XY com spin-1/2 e interações antiferromagnéticas

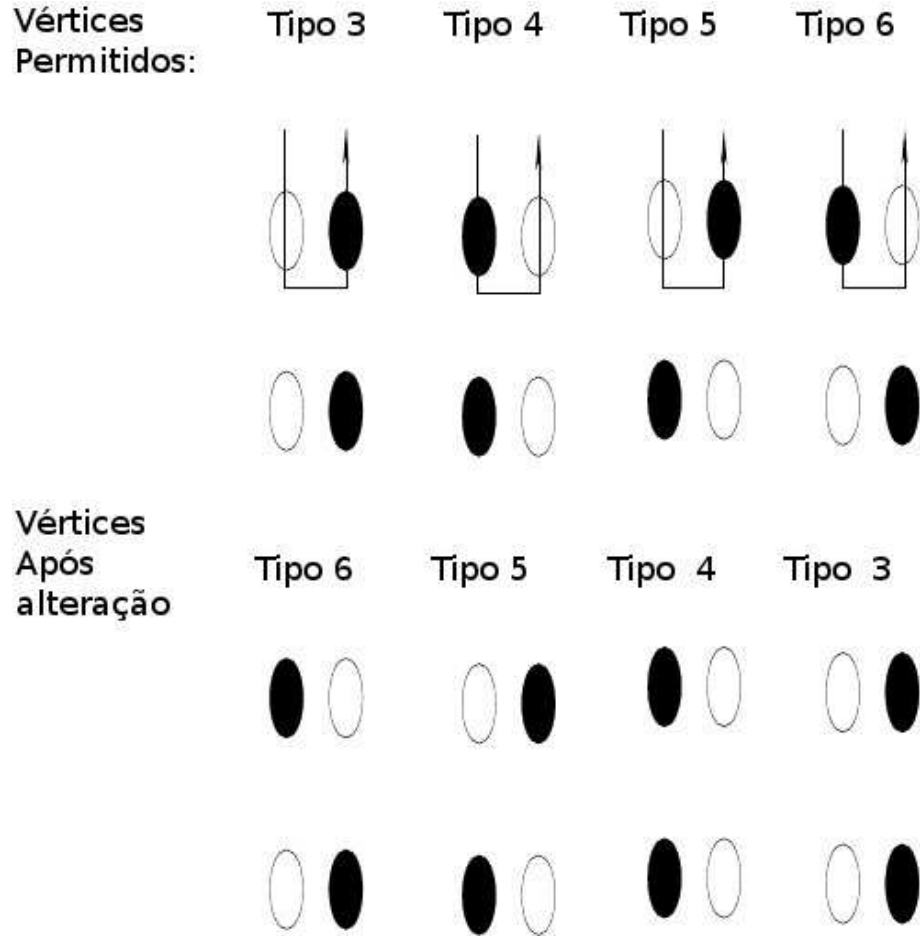


Figura 3.10: Parte superior: Vértices permitidos em um algoritmo determinístico de operador-laço no caso do modelo de Heisenberg antiferromagnético. A perna de entrada é a perna superior esquerda (perna 1) e a perna de saída é a direita superior (perna 2) Parte inferior: Vértices alterados com os estados dos spins na perna entrada e saída trocados ( $-\frac{1}{2} \leftrightarrow \frac{1}{2}$ ). O tipo de operadores de ligação e os tipos de vértices foram todos alterados.

Apenas em alguns casos especiais, é possível modificar o algoritmo de tal modo que o processo "Quicar" seja completamente excluído no algoritmo de banho térmico. Isso significa que não haverá backtracking e todos segmentos do laço realizam mudanças na configuração. Um caso em que isso acontece é no modelo de Heisenberg antiferromagnético com spin  $\frac{1}{2}$ ,

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z. \quad (3.58)$$

Esse é um caso especial do modelo  $XXZ$ , 3.16, com campo magnético externo  $h = 0$  e anisotropia  $\Delta = 1$ . Se escolhermos a constante  $C = \frac{1}{4}$ , os elementos de matriz dados pela tabela 3.1 agora possuem os mesmos valores que na tabela 3.2, o que implica que os vértices com todos os spins para cima (primeiro elemento) e para baixo (segundo elemento)

desaparecem e os quatro elementos restantes são todos iguais a  $\frac{1}{2}$ . Logo, o processo "Quicar" é excluído e o único processo remanescente é o "Trocar e Voltar" mostrado na figura 3.10 e o caminho é então determinístico. Neste caso, cada perna de vértice pode ser unicamente designada a um laço, e o estado dos spins de cada laço pode ser trocado independentemente. Ao invés de escolher aleatoriamente um ponto inicial e construir um número fixo de laços, pode-se construir todos os laços possíveis (sem repetição), escolhendo um ponto de partida que não pertença a nenhum laço previamente construído. Os estados dos spins dos laços devem ser trocados com probabilidade  $\frac{1}{2}$ . Os laços são construídos dessa forma até que todas  $4 * n$  pernas de vértices tenham sido visitadas. Esse método de construir todos os laços é análogo ao método clássico de vários-clusters de Swenden-Wang [43], no qual a construção do operador-laço no caso genérico (não-determinístico) é similar ao algoritmo de Wolff de um cluster [44].

Outro caso especial é o modelo  $XY$  antiferromagnético,

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y, \quad (3.59)$$

na qual  $J > 0$ .

Este é um caso especial do Hamiltoniano na Eq. 3.16, com campo magnético externo  $h = 0$  e anisotropia  $\Delta = 0$ . Se nós escolhermos a constante  $C = \frac{1}{2}$ , os elementos de matriz na tabela 3.1 terão o mesmo valor  $\frac{1}{2}$  mostrados na tabela 3.3. O peso é, novamente, dependente apenas de  $n$  e não se altera com o operador de laço. O processo "Quicar" pode ser também excluído, restando apenas as duas saídas permitidas para cada vértice.

### 3.6.2 Balanço Detalhado do laço dirigido

Além do algoritmo de banho térmico, existe um outro esquema mais geral com maior controle da probabilidade do processo "Quicar" durante a construção do laço. Esse esquema é baseado em um conjunto de equações que satisfazem o balanço detalhado e são usados para determinar a probabilidade de saída em um perna, dada uma perna de entrada e o tipo do vértice atual. É possível mostrar que o processo "Quicar" pode ser completamente removido para alguns modelos [38]. Esse novo esquema é chamado *esquema de laço dirigido* (directed loop scheme) no sentido que a construção do caminho de vértices é direcional, isto é, a probabilidade de saída de uma perna particular, dada a perna de entrada, é diferente da probabilidade do processo reverso.

Começando da equação de balanço detalhado, Eq. (3.46),

$$W(A)P(A \rightarrow B) = W(B)P(B \rightarrow A)$$

na qual  $A$  denota a configuração de peso  $W(A)$ . No algoritmo  $W(A)$  é representado como um produto de pesos de vértices, Eq. (3.50).  $P(A \rightarrow B) = P_t(A \rightarrow B)P_a(A \rightarrow B)$  é a probabilidade de transição que constitui na alteração da configuração  $A$  para configuração  $B$ . Diferentemente dos pesos que são dados pelo Hamiltoniano (produto de elementos de matriz), a probabilidade de transição de como alterar a configuração  $P(A \rightarrow B)$  depende da matriz  $\mathbf{P}$  usada.

Na representação de vértices encadeados de uma configuração de SSE, uma perna de entrada inicial é selecionada aleatoriamente dentre as  $4 * n$  pernas. Depois uma perna de saída do mesmo vértice é escolhida com certa probabilidade e os spins da entrada e saída são alterados. Assumimos que tal mudança na perna de saída é unicamente ditada pela mudança na perna de entrada. Este processo repete-se considerando a perna ligada à saída como a nova perna de entrada que por sua vez resulta em outra perna de saída e assim por diante. Este processo pára quando a perna inicial é alcançada. A probabilidade para chegar em uma nova configuração  $B$  a partir da configuração  $A$  pode ser escrita como:

$$P(A \rightarrow B) = \sum_{\text{todos os laços possíveis}} P(l_0) \times P(A, l_0 \rightarrow A_1, l_1) \times P(A_1, l_1 \rightarrow A_2, l_2) \times \cdots \times P(A_{n-1}, l_{n-1} \rightarrow B, l_0), \quad (3.60)$$

na qual  $P(l_0)$  denota a probabilidade de escolher uma perna  $l_0$  como entrada inicial e  $P(A_i, l_i \rightarrow A_{i+1}, l_{i+1})$  é a probabilidade de saída em uma perna  $l'_{i+1}$  dada uma configuração  $A_i$  e perna de entrada  $l_i$ . A perna de saída  $l'_{i+1}$  é conectada à próxima perna de entrada  $l_{i+1}$  pelo encadeamento entre os vértices, resultando em uma nova configuração  $A_{i+1}$ . A perna de saída  $l'_{i+1}$  não aparecerá explicitamente nas probabilidades já que elas são unicamente ligadas à perna de entrada seguinte  $l_{i+1}$ . A soma na Eq. (3.60) é sobre todos os laços possíveis os quais terminam na nova configuração  $B$ . Para achar um modo conveniente de escolher as probabilidades no lado direito da Eq. (3.60) é preciso encontrar uma expressão para o processo inverso, na qual a configuração  $B$  é transferida de volta para a  $A$ . Isso pode ser escrito simplesmente observando que para cada termo na Eq. (3.60) existe um termo correspondente que descreve o caminho invertido que contribui

para probabilidade inversa, isto é,

$$P(B \rightarrow A) = \sum_{\text{todos os laços possíveis}} P(l_0) \times P(B, l_0 \rightarrow A_{n-1}, l_{n-1}) \times P(A_{n-1}, l_{n-1} \rightarrow A_{n-2}, l_{n-2}) \\ \times \cdots \times P(A_2, l_2 \rightarrow A_1, l_1) \times P(A_1, l_1 \rightarrow A, l_0), \quad (3.61)$$

na qual a soma é realizada sobre os laços como na Eq. (3.60).

Inserindo os pesos, Eq. (3.36), probabilidades de transição 3.60 e 3.61, na equação de balanço detalhado Eq. (3.46), achamos que o balanço detalhado é satisfeito se

$$W(A_i)P(A_i, l_i \rightarrow A_{i+1}, l_{i+1}) = W(A_{i+1})P(A_{i+1}, l_{i+1} \rightarrow A_i, l_i), \quad (3.62)$$

para todas configurações intermediárias possíveis  $A_i$  com suas pernas de entradas correspondentes  $l_i$ . Devido ao fato do processo  $(A_{i+1}, l_{i+1})$  mudar apenas um vértice particular, todos, exceto um dos fatores do produto de pesos de vértices na Eq. (3.46) se cancelam.

Para simplificar a notação vamos introduzir  $a$  como,

$$P(A_i, l_i \rightarrow A_{i+1}, e_i) = \frac{a(A_{i+1}, e_i \rightarrow A_i, l_i)}{W(A_{i+1})} \quad (3.63)$$

onde  $W(A_{i+1})$  é o elemento de matriz correspondente a um único vértice,  $l_i$  é a perna de entrada, e  $e_i$  é a perna de saída desse mesmo vértice o qual é ligado à próxima perna de entrada  $l_{i+1}$  na Eq. (3.62) de acordo com o encadeamento dos vértices. Com essa notação, pode-se escrever a Eq. (3.62) como

$$a(A_i, l_i \rightarrow A_{i+1}, e_i) = a(A_i, e_i \rightarrow A_i, l_i), \quad (3.64)$$

que deve ser válida para todos os vértices que podem ser convertidos entre si pela alteração dos estados nas pernas de entrada e saída. Essa equação dá origem a várias relações entre probabilidades desconhecidas, tal como a probabilidade de escolher a perna de saída dado uma vértice e uma perna de entrada. Outra relação que deve ser obedecida é que sempre deve haver uma saída do vértice,

$$\sum_{e_i} P(A_i, l_i \rightarrow A_{i+1}; e_i) = 1, \quad (3.65)$$

na qual a soma é sobre todas as pernas do vértice. A notação  $A_{i+1}$  significa que a configuração de spin resultante depende da perna de saída resultante  $e_i$ . Ao inserir os valores  $P(A_i, l_i \rightarrow A_{i+1}, e_i)$  da Eq. (3.63) na Eq. (3.65) obtemos:

$$\sum_{e_i} a(A_i, l_i \rightarrow A_{i+1}, e_i) = W(A_i). \quad (3.66)$$



As equações 3.63 e 3.66 continuam as *equações de laço dirigidas*, das quais contruímos as tabelas de probabilidades  $a$  utilizadas na simulação.

### 3.6.3 Equações de laço dirigidas

Nessa seção investigamos a estrutura das Equações de Laço Dirigidas (ELD), 3.63 e 3.66. Vamos considerar apenas o caso no qual existam leis de conservação (na qual a mudança na perna de saída é unicamente ditada pela mudança na perna de entrada ).

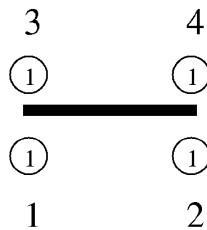


Figura 3.11: Exemplo de um vértice onde a perna de entrada é a perna esquerda inferior. O números dentro do círculo indicam o estado do spin

Para descrever a forma geral das ELD para interações gerais com  $N_{pernas}$  é conveniente abreviar a nomenclatura em relação à utilizada na última seção. Para definir essa nova nomenclatura definimos um vértice de referência (que pode ser qualquer um dos vértices permitidos). Consideremos, por exemplo, um vertice no qual as quatro pernas têm o estado de spin igual a 1 e definimos seu peso correspondente como  $W_1$ . Também escolhemos uma perna de entrada definida como perna 1, e numeramos as pernas restantes como  $2, 3 \dots, n = N_{pernas}$ , veja Fig 3.11.

Também é necessário decidir como o estado na perna de entrada será alterado (aumentar ou reduzir a componente de spin, por exemplo). Desta forma, as equações são aplicadas ao vértice com peso  $W_1$  e com uma mudança específica na perna de entrada 1. Ao mudar o estado nas pernas de entrada e saída (de acordo com a lei de conservação) chegamos em um novo vértice. Na Fig 3.12 podem ser vistos os quatro processos possíveis aplicados ao vértice  $W_1$  na perna de entrada 1 e pernas de saída 2, 3 e 4. O resultado do processo é observado na segunda linha da figura.

Distribuindo o peso sobre todas pernas de saída possíveis de acordo com Eq. 3.66 temos

$$W_1 = a_{11} + a_{11} + a_{12} + \dots + a_{1n}, \quad (3.67)$$

na qual nomeamos os pesos  $a_{ij}$  pela sua perna de entrada (i) e saída (j). Nomeamos como

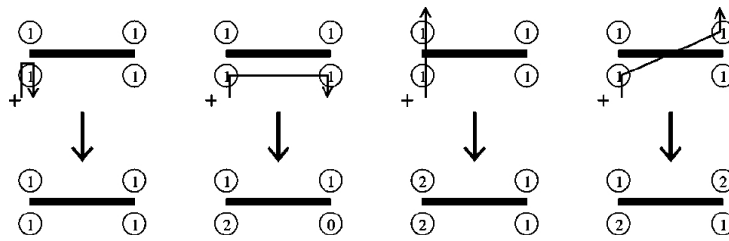


Figura 3.12: Os vértices na segunda linha são obtidos a partir da perna de entrada 1 e da seleção de pernas de saída diferentes (2, 3 e 4) como definidas na figura 3.11. A lei de conservação é tal que a soma dos estados abaixo de cada vértice é igual à soma acima (a magnetização se conserva durante o processo). O sinal + na perna de entrada indica que seu estado deve ser aumentado em uma unidade.

$W_j$  o peso do vértice produzido ao sair pela perna  $j$ . Logo, se a saída fosse na perna 2, nomearíamos com  $W_2$ .

Começamos no vértice  $W_2$  e mudamos o estado na perna 2 na direção *oposta* àquela feita quando a perna 2 era uma perna de saída. Considerando a saída em qualquer uma dessas pernas, obtemos para  $W_2$  uma decomposição similar a de  $W_1$ :

$$W_2 = a_{21} + a_{21} + a_{22} + \dots + a_{2n}, \tag{3.68}$$

na qual a entrada é na perna 2 do vértice, com peso  $W_2$  que difere do vértice 1 pela mudança nos estados da perna 1 e 2. O peso  $a_{21}$  corresponde ao processo no qual a entrada é na perna 2 e a saída é na perna 1. Os estados são mudados na direção *oposta* em relação a quando se chega em  $W_2$  a partir de  $W_1$ . Desta forma, o processo desfaz as mudanças e retorna ao vértice  $W_1$ . Na Fig 3.13 observamos o processo no sentido inverso ao da Fig 3.12.

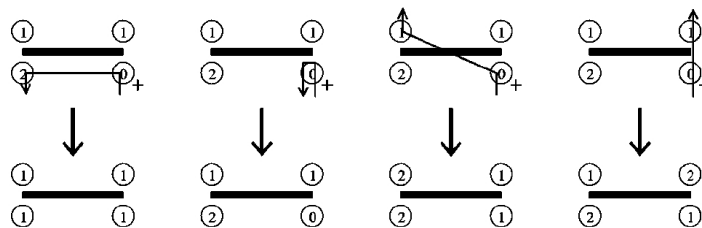


Figura 3.13: Os vértices (segunda linha) são produzidos por pernas de saídas diferentes ao representados na Fig 3.12 (segundo da esquerda) quando a perna de entrada é a perna 2 e o estado muda na direção oposta da indicada na Fig 3.12.

Da Eq. 3.63 segue que  $a_{21} = a_{12}$ . Podemos ver que saindo na perna 3 ou maior, resulta-se no mesmo vértice que quando começando de  $W_2$  ou  $W_1$ . Isso se deve pois começando de  $W_1$  mudamos os estados nas pernas 1 e 3 enquanto começando de  $W_2$  mudamos os

estados nas pernas 2 e 3. Porém  $W_2$  difere de  $W_1$  apenas pelos estados nas pernas 1 e 2. Logo, o estado na perna 2 é alterado *duas vezes* em direções opostas, resultando na mesma configuração  $W_3$ . Um exemplo ilustrando isso pode ser visto na Fig. 3.14.

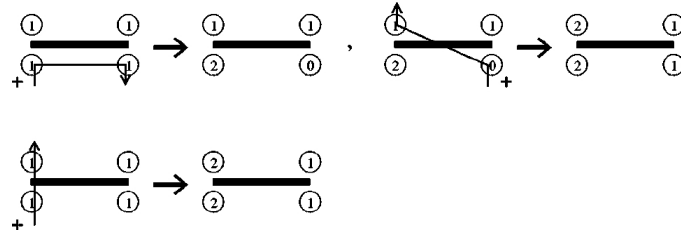


Figura 3.14: Dois modos diferentes de chegar ao vértice 3 na Fig. 3.12. Na linha de cima o processo vai do vértice 1 ao 3 através do vértice 2. Enquanto na linha de baixo vai diretamente de 1 para 3.

Os pesos são unicamente definidos por esse procedimento, e é garantido que apenas vértices relacionados pelas equações de balanço detalhado podem ser produzidos pela mudança dos estados na perna de entrada juntamente com qualquer perna de saída do vértice de referencia. As ELD pode então ser escritas como

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ W_3 \\ W_4 \end{pmatrix}, \quad (3.69)$$

na qual a matriz do lado esquerdo é uma matriz  $(n \times n)$  real e simétrica com todos elementos não-negativos para evitar probabilidades negativas. As soluções anteriores das seções 3.6.1 e 3.5.2 podem ser representadas como soluções particulares dessa matrix estocática  $\mathbf{a}$ . Os elementos diagonais determinam as probabilidades do processo de "Quicar", no qual a perna de saída é a mesma que a perna de entrada. Como dito anteriormente na seção 3.5.2 esse processo é indesejado e várias soluções consistem na minimização desse processo porque configuram desperdício de esforço computacional já que não geram novas configurações.

### 3.6.4 Quicagem Mínima

Essa é a solução intuitiva utilizada na seção 3.5.2, que foi obtida para um caso particular sem analisar as equações de laço dirigidas diretamente. A solução equivalente para outros sistemas consiste na minimização dos termos da diagonal  $\min(\sum_{i=1}^n a_{ii})$ . Como

observado pelos autores em [41], em alguns sistemas isso foi insuficiente para chegar em uma solução ótima, na qual diversas outras restrições suplementares foram realizadas para obter um ganho significativo de eficiência. Entretanto, mesmo com apenas a minimização das "quicagens", uma eficiência maior do que a solução de banho térmico[39] foi observada. Em [37] observou-se que, quando o sistema não apresenta solução livre de "quicagens", manter apenas o maior peso da diagonal se mostra mais eficiente que a simples minimização global dos elementos diagonais. Essa solução tem uma característica próxima da "Solução ótima local".

### 3.6.5 Solução ótima local

Os autores em [40] realizam uma comparação de várias soluções das ELD. Dentre elas propuseram uma solução utilizando uma matriz estocástica obtida por Frigessi em [46]. Utilizando essa matriz eles afirmam obter menor tempo de autocorrelação de um observável  $Q$ , considerando todos os  $Q$  possíveis. A matriz utilizada pode produzir o menor tempo de correlação para um observável genérico, utilizando um critério minmax, no qual este é o melhor caso quando analisado sob o ponto de vista do pior-caso de qualquer  $Q$  possível, sem explorar nenhum conhecimento a priori de um  $Q$  específico. É intuitivo achar que essa solução seja ótima se considerarmos o tempo de convergência quando se tem interesse por vários observáveis diferentes. No trabalho de Frigessi [46] e também no trabalho em [40] fica claro que outras soluções mais eficientes podem ser produzidas utilizando-se de matrizes irreversíveis ou explorando propriedades específicas de um observável em questão, entretanto, não há um modo prático para construir essas matrizes.

## 3.7 Cálculo de quantidades físicas usando o método SSE

Nas seções anteriores mostramos como é possível calcular a energia por spin na representação SSE a partir da expressão:

$$\langle e \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} (\ln(Z)), \quad (3.31)$$

na qual obtemos

$$\langle e \rangle = -\frac{1}{N\beta} \langle n \rangle. \quad (3.32)$$

Nessa seção mostraremos como é feito o cálculo da média de outras quantidades termodinâmicas de interesse.

### 3.7.1 Calor Específico

Podemos avaliar o calor específico facilmente a partir da expressão para energia:

$$\begin{aligned} C &= N \frac{\partial \langle e \rangle}{\partial T}, \\ C &= -N \beta^2 \frac{\partial \langle e \rangle}{\partial \beta}, \end{aligned} \quad (3.70)$$

Substituindo Eq. (3.31) na equação anterior e seguindo o procedimento análogo ao desenvolvido no cálculo da energia, obtemos:

$$\begin{aligned} C &= \beta^2 \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 \right), \\ &= \beta^2 \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \right) - \langle n \rangle^2 \\ &= \frac{\beta^2}{Z} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \left( \sum_{\sigma} \sum_{S_{M,n}} \frac{(-\beta)^n (M-n)!}{M!} \langle \alpha_{\sigma} | \prod_{p=n}^1 H_{a(p),b(p)} | \alpha_{\sigma} \rangle \right) - \langle n \rangle^2 \\ &= \frac{\beta^2}{Z} \left( \sum_{\sigma} \sum_{S_{M,n}} \frac{n(n-1)}{\beta^2} \frac{(-\beta)^n (M-n)!}{M!} \langle \alpha_{\sigma} | \prod_{p=n}^1 H_{a(p),b(p)} | \alpha_{\sigma} \rangle \right) - \langle n \rangle^2 \\ &= \left( \sum_{\sigma} \sum_{S_{M,n}} (-n + n^2) P(\sigma, S_{M,n}) \right) - \langle n \rangle^2 \\ C &= \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle - \langle n \rangle^2 \end{aligned} \quad (3.71)$$

onde  $P(\sigma, S_{M,n})$  é a mesma probabilidade definida anteriormente

$$P(\sigma, S_{M,n}) = \frac{W(\sigma, S_{M,n})}{Z} = \frac{(\beta)^n (M-n)!}{Z M!} \langle \alpha_{\sigma} | \prod_{p=n}^1 H_{a(p),b(p)} | \alpha_{\sigma} \rangle. \quad (3.30)$$

### 3.7.2 Susceptibilidade Estática de spin

A função de correlação spin-spin,

$$C^{z,z}(i, j) = C(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \langle S_i^z S_j^z \rangle, \quad (3.72)$$

é obtida pela média das correlações dos estados propagados  $|\alpha(p)\rangle$  [37] (Eq. 3.33). Para avaliar essa correlação é necessário saber o estado do spin de índice  $i$ , após a atuação de

$p$  operadores da sequência  $S_{M,n}$ :

$$S_i^z[p] = \langle \alpha(p) | S_i^z | \alpha(p) \rangle. \quad (3.73)$$

Utilizando essa notação podemos escrever a função correlação como [33]

$$C(i, j) = \left\langle \frac{1}{n+1} \sum_{p=0}^{n-1} S_i^z[p] S_j^z[p] \right\rangle. \quad (3.74)$$

A susceptibilidade estática correspondente

$$\chi(i, j) = \int_0^\beta d\tau \langle S_i(\tau) S_j(0) \rangle, \quad (3.75)$$

envolve correlações entre todos estados propagados [29, 33]:

$$\chi(i, j) = \left\langle \frac{\beta}{n(n+1)} \left( \left( \sum_{p=0}^{n-1} S_i^z[p] \right) \left( \sum_{p=0}^{n-1} S_j^z[p] \right) + \left( \sum_{p=0}^{n-1} S_i^z[p] S_j^z[p] \right) \right) \right\rangle. \quad (3.76)$$

Funções de correlação não-diagonais podem ser calculadas diretamente para operadores que podem ser expressos em termos de operadores de troca de spin:

$$\hat{H}_b^+ = S_{i(b)}^+ S_{j(b)}^- \quad (3.77)$$

$$\hat{H}_b^- = S_{i(b)}^- S_{j(b)}^+ \quad (3.78)$$

na qual  $b$  é o índice que determina a ligação entre os spins de índice  $i$  e  $j$ . A soma desses operadores é equivalente ao operador não-diagonal da Eq. (3.20):

$$\hat{H}_{2,b} = \hat{H}_b^+ + \hat{H}_b^- \quad (3.79)$$

A constante de rigidez de spin, que será discutida a seguir, envolve a susceptibilidade estática definida em termos desses operadores.

Apesar da sequência de operadores ser formada por  $\hat{H}_{2,b}$  ainda pode-se acessar os termos  $\hat{H}_b^+$  e  $\hat{H}_b^-$  individualmente já que apenas um deles pode propagar um dado estado.

A função correlação em tempos iguais pode ser escrita como:

$$F_{\gamma, \gamma'}(b, b') = \langle \hat{H}_a^\gamma \hat{H}_b^{\gamma'} \rangle \quad (3.80)$$

na qual  $\gamma, \gamma' \in [+, -]$  indica o tipo de operador,  $b$  e  $b'$  indica os spins nos quais os operadores atuam. Utilizando as notações introduzidas nas seções anteriores podemos reescrevê-la

como:

$$F_{\gamma,\gamma'}(b,b') = \left( \sum_{\alpha\sigma} \sum_{S_{M,n}} (\hat{H}_b^\gamma \hat{H}_{b'}^{\gamma'}) P(\sigma, S_{M,n}) \right). \quad (3.81)$$

na qual a média é realizada sobre diferentes configurações  $|\alpha_\sigma(0)\rangle = |S_1^z \cdots S_N^z\rangle$  e sobre diferentes sequências de operadores  $S_{M,n}$ .

De forma similar a realizada na ref. [29], podemos relacionar  $(\hat{H}_b^\gamma \hat{H}_{b'}^{\gamma'}) P(\sigma, S_{M,n})$  com  $\frac{(n-1)}{\beta^2} P(\sigma, S_{M,n+2})$  considerando os operadores de troca como os dois últimos operadores de uma sequência com  $n+2$  operadores. Desta forma, a correlação pode ser escrita como:

$$F_{\gamma,\gamma'}(b,b') = \left\langle \frac{n-1}{\beta} N(b\gamma; b'\gamma') \right\rangle, \quad (3.82)$$

na qual  $N(b\gamma; b'\gamma')$  é o número de vezes que o produto  $\hat{H}_b^\gamma \hat{H}_{b'}^{\gamma'}$  aparece (nesta ordem) na sequência de operadores  $S_{M,n}$ .

A susceptibilidade estática correspondente,

$$\chi_{\gamma,\gamma'}(b,b') = \int_0^\beta d\tau \langle \hat{H}_b^\gamma(\tau) \hat{H}_{b'}^{\gamma'}(0) \rangle \quad (3.83)$$

pode ser obtida avaliando o produto:

$$\hat{H}_b^\gamma(\tau) \hat{H}_{b'}^{\gamma'}(0) = e^{\tau \hat{H}} \hat{H}_b^\gamma e^{-\tau \hat{H}} \hat{H}_{b'}^{\gamma'}. \quad (3.84)$$

A média desse produto avaliada pela expansão em série é dada por:

$$\langle \hat{H}_b^\gamma(\tau) \hat{H}_{b'}^{\gamma'}(0) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha\sigma} \sum_n \sum_{n'} \frac{(\tau-\beta)^n (-\tau)^{n'}}{n! n'} \langle \alpha_\sigma | H^n H_b^\gamma H^{n'} H_{b'}^{\gamma'} | \alpha_\sigma \rangle, \quad (3.85)$$

que após integração pode ser escrito como [29]:

$$\chi_{\gamma,\gamma'}(b,b') = \int_0^\beta d\tau \langle \hat{H}_b^\gamma(\tau) \hat{H}_{b'}^{\gamma'}(0) \rangle = \langle N(b\gamma) N(b'\gamma') - \delta_{b,b'} \delta_{\gamma,\gamma'} N(b\gamma) \rangle \frac{1}{\beta} \quad (3.86)$$

na qual  $N(b,\gamma)$  é o número total de operadores  $\hat{H}_b^\gamma$  em  $S_{M,n}$ .

### 3.7.3 Rigidez de spin (Spin stiffness)

Um estimador direto para a rigidez de spin  $\rho_s$  pode ser construído a partir da susceptibilidade estática não-diagonal Eq. (3.86). Esse é definido como a derivada segunda da energia livre em relação a uma torção  $\Phi$  na condição de contorno, em torno de um eixo perpendicular à direção da quebra de simetria. Em um sistema de tamanho finito a simetria não é quebrada, logo um fator  $\frac{3}{2}$  tem que ser incluído no cálculo da rigidez de

spin para levar em consideração a média de rotação, em modelos planares esse fator não é necessário. Distribuindo a torção igualmente sobre todos pares de spins interagentes  $\langle i, j \rangle_x$  na direção  $x$ , a definição de tamanho-finito para  $\rho_s$  é então

$$\rho_s = -\frac{1}{L^2} \frac{\partial^2 \ln Z(\phi)}{\partial \phi^2} \Big|_{\phi=0} \quad (3.87)$$

na qual  $\phi = \Phi/L$ . Uma expressão que depende apenas do estado fundamental em  $\phi = 0$  é obtida pela expansão do Hamiltoniano (Heisenberg) até segunda ordem em  $\phi$ . O Hamiltoniano na presença da torção é

$$\hat{H}(\phi) = \sum_{\langle i, j \rangle_x} \hat{S}_i \cdot R(\phi) \hat{S}_j + \sum_{\langle i, j \rangle_y} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j, \quad (3.88)$$

na qual  $R(\phi)$  é a matriz de rotação

$$R(\phi) = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & \sin(\phi) & 0 \\ -\sin(\phi) & \cos(\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.89)$$

Expandindo até segunda ordem em  $\phi$  obtemos

$$\begin{aligned} \hat{H}(\phi) - \hat{H}(0) &= -\frac{1}{2} \sum_{\langle i, j \rangle_x} [\phi^2 (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \\ &\quad + i\phi (S_i^+ S_j^- - S_i^- S_j^+)]. \end{aligned} \quad (3.90)$$

O primeiro termo é proporcional a  $\hat{H}(0)$  (devido à invariância rotacional considerada aqui). O valor esperado do segundo termo se anula, mas dá uma contribuição quadrática em  $\phi$  na teoria de perturbação de segunda ordem. Definindo o operador corrente de spin

$$j_s = \frac{i}{2} \sum_{\langle i, j \rangle_x} (S_i^+ S_j^- - S_i^- S_j^+), \quad (3.91)$$

e a função de correlação corrente-corrente na frequência de Matsubara  $\omega_m = 2\pi mT$  [34],

$$\Lambda_s(\omega_m) = \frac{1}{L^2} \int_0^\beta d\tau e^{-i\omega_m \tau} \langle j_s(\tau) j_s(0) \rangle, \quad (3.92)$$

a rigidez de spin é dada por

$$\rho_s = -\frac{3}{2} \left[ -\frac{1}{3} E + \Lambda_s(0) \right]. \quad (3.93)$$

A estimativa para energia é dada pela eq. (3.32). O correlacionador corrente-corrente  $\Lambda_s \equiv \Lambda_s(0)$  é uma soma de integrais da forma da eq. 3.86. Denotando por  $N_x^+$  e  $N_x^-$  o número de operadores  $\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^-$  e  $\hat{S}_i^- \hat{S}_j^+$  com  $\langle i, j \rangle$  sendo uma ligação na direção  $x$ , Eqs.



(3.92) e (3.87) resulta em

$$\rho_s = -\frac{3}{2\beta N} \langle (N_x^+ - N_x^-)^2 \rangle, \quad (3.94)$$

isto é, os termos lineares em  $N_x^+$  e  $N_x^-$  se cancelam. Definindo os "winding numbers"  $w_x$  e  $w_y$  na direções  $x$  e  $y$ :

$$w_\alpha = \frac{(N_\alpha^+ - N_\alpha^-)}{L} \quad (\alpha = x, y), \quad (3.95)$$

a rigidez de spin pode também ser escrita como

$$\rho_s = -\frac{3}{4\beta} \langle w_x^2 + w_y^2 \rangle. \quad (3.96)$$

Essa definição é claramente válida apenas para uma simulação que amostra todos setores de "winding numbers". Com a restrição ao subespaço com  $w_x = w_y = 0$ ,  $\rho_s$  pode ser calculado usando o limite de comprimento de onda longo de um correlacionador corrente-corrente envolvendo um campo torção com uma modulação espacial [47]. O método de cálculo da rigidez de spin a partir da flutuação do "winding number" é fortemente relacionado aos métodos usados para densidade de superfluidez em simulações com modelos de bósons [48].

### 3.7.4 Escala de tamanho finito para rigidez de spin

Em transições clássicas, a escala microscópica de energia  $J$  é relevante apenas para rescala de temperatura. Desta forma, a função de escala para energia livre em campo  $B = 0$ , pode ser escrita como[19]:

$$E_s(t) = b^{-d} f(tb^{\frac{1}{\nu}}), \quad (3.97)$$

na qual  $t = |1 - \frac{T}{T_c}|$  é a temperatura reduzida.

Pela definição da rigidez de spin  $\rho_s = -\frac{1}{L^2} \frac{\partial^2 \ln Z(\phi)}{\partial \phi^2} |_{\phi=0}$ , espera-se que a função de escala para rigidez de spin se comporte como:

$$\rho(t) = b^{2-d} f_\rho(tb^{\frac{1}{\nu}}). \quad (3.98)$$

Escolhendo  $b = L$  obtemos as relações de escala para tamanho finito  $L$ , na qual podemos obter o colapso das curvas de  $\rho(t)L^{2-d}$  por  $tL^{\frac{1}{\nu}}$  para sistemas com diferentes tamanhos. Também é possível obter o ponto da transição através do ponto fixo  $\rho(0) = L^{2-d} f(0)$  no qual curvas de rigidez de spin para sistemas de diferentes tamanhos se interceptam.

No caso de transições quânticas, a escala microscópica de energia  $J$  é importante. Logo, a função de escala para energia livre em campo  $B = 0$  deve ser escrita como:

$$\frac{E_s(g)}{J} = b^{-d+y} f(gb^{\frac{1}{\nu}}) \quad (3.99)$$

na qual  $g = |1 - \frac{D}{D_c}|$  é a anisotropia reduzida,  $z$  é o expoente dinâmico crítico e  $y = z$  indica proximidade da transição quântica.

Estendendo a função de escala para temperaturas finitas ( $(\frac{T}{J})' = b^y \frac{T}{J}$ ) e utilizando  $y = z$  obtemos:

$$\frac{E_s(g)}{J} = b^{-d+z} f(gb^{\frac{1}{\nu}}, (b^z T)^{-1}), \quad (3.100)$$

novamente pela definição da rigidez de spin, espera-se que a função de escala para rigidez de spin se comporte como:

$$\rho(g, T) = b^{2-d-z} f_\rho(gb^{\frac{1}{\nu}}, (b^z T)^{-1}). \quad (3.101)$$

Novamente podemos escolher  $b = L$  e  $T = b^{-z}$  para obter as relações de escala para tamanho finito  $L$  e obter o colapso das curvas pela análise de  $\rho(g)L^{2-d-z}$  em função de  $gL^{\frac{1}{\nu}}$ . De forma similar, pode-se obter o ponto da transição através do ponto fixo  $\rho(0) = L^{2-d-z} f(0, 1)$ .

Observando a Eq. (3.101) e Eq. (3.94)

$$\rho_s = -\frac{3}{2\beta N} \langle (N_x^+ - N_x^-)^2 \rangle, \quad (3.94)$$

vemos que para  $b = L$  e  $L_\tau = \frac{1}{T}$  podemos escrever:

$$-\frac{3}{2} \langle (N_x^+ - N_x^-)^2 \rangle = L^2 \frac{L^\tau}{L^z} f_n(gL^{\frac{1}{\nu}}, \frac{L^z}{L^\tau}) \quad (3.102)$$

$$-\frac{3}{2} \langle (N_x^+ - N_x^-)^2 \rangle = L^2 f'_n(gL^{\frac{1}{\nu}}, \frac{L^z}{L^\tau}) \quad (3.103)$$

obtendo a seguinte relação de escala para  $\rho_s$ :

$$\rho_s = -\frac{3}{2L_\tau L^d} \langle (N_x^+ - N_x^-)^2 \rangle, \quad (3.104)$$

$$\rho_s = \frac{L^2}{L_\tau L^d} f'_n(gL^{\frac{1}{\nu}}, \frac{L^z}{L^\tau}), \quad (3.105)$$

$$\rho_s = \frac{1}{L_\tau L^{d-2}} f'_n(gL^{\frac{1}{\nu}}, \frac{L^z}{L^\tau}), \quad (3.106)$$

ou finalmente,

$$\rho_s = \frac{T}{L^{d-2}} f'_n(gL^{\frac{1}{\nu}}, TL^z) \quad (3.107)$$

## 4 *Modelo XY anisotrópico em três dimensões*

Nesse capítulo descrevemos os resultados obtidos pelas simulações. O modelo XY tri-dimensional com anisotropia de plano-fácil é descrito pela hamiltoniana Eq 1.1.

$$\hat{\mathcal{H}} = J_1 \sum_{(i,m)_1} \hat{S}_i^x \hat{S}_m^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_m^y + J_2 \sum_{(i,m)_2} \hat{S}_i^x \hat{S}_m^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_m^y + \sum_i D(\hat{S}_i^z)^2 \quad (1.1)$$

na qual  $S_i^x, S_i^y, S_i^z$ , são os operadores de Spin para as componentes do spin do iésimo sítio da rede e  $D > 0$  é a anisotropia de íon único e  $J_1, J_2 > 0$  são interações antiferromagnéticas no plano e fora do plano respectivamente, como descritos no capítulo 1.

Na primeira seção apresentamos o diagrama de fase do modelo para spin 1. Na seção seguinte mostramos como foi obtido o diagrama de fase e os expoentes críticos. Finalmente, comparamos o diagrama de fase para os casos de spin  $S = 1, \frac{3}{2}$  e 2. Grande parte dos resultados apresentados aqui foram obtidos usando a biblioteca ALPS [36] com o algoritmo de laços dirigidos [38] na representação SSE, utilizando matriz estocástica local ótima [40]. Para construir o diagrama de fase utilizamos o comportamento de tamanho finito da rigidez de spin. Simulamos sistemas de tamanho  $(L \times L \times L)$  com condições periódicas de contorno, para  $L \in (4, 24)$ . Em temperaturas altas, descartamos  $2 * 10^5$  Passos de Monte Carlo (PMC) para termalização e consideramos os  $2 * 10^6$  PMC seguintes para medidas. Próximo da anisotropia crítica  $D_c$  descartamos  $5 * 10^4$  PMC para termalização e usamos  $5 * 10^5$  PMC para medidas. Para  $D > D_c$ , usamos  $10^5$  PMC para termalização e  $10^6$  PMC para medidas. Os erros devido ao tamanho de rede finito (e similarmente a  $\beta$  finito próximo do ponto crítico quântico), foram calculados pela diferença entre a estimativa obtida pelas maiores redes simuladas e aquela obtida pelas duas menores redes simuladas. As barras de erro nas figuras são menores que os símbolos quando estes não aparecem. A unidade de temperatura utilizada ao longo desse capítulo é dada em  $\frac{J}{k_b}$ . O parâmetro  $\alpha$  é o mesmo que definido na introdução (ver figura 1.2) na qual  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$  é a

razão entre as interações.

## 4.1 Diagrama de fase $S = 1$

Para  $D > D_c$ , o sistema se encontra em um estado desordenado onde há um gap de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. O estado fundamental é caracterizado por uma magnetização total  $M_{total}^z = \sum_i S_i^z = 0$ . O primeiro estado excitado encontra-se no setor de magnetização  $M_{total}^z = \pm 1[1]$ . Na região  $D < D_c$  o sistema é ordenado e sem gap. Uma transição de fase quântica pode ser observada em  $T = 0$  ao variar o parâmetro  $D$  através do ponto de anisotropia crítica  $D = D_c$ .

Um resultado interessante é o aumento em  $T_c$  com  $D$  para  $D$  pequeno. Nesse trabalho obtemos o diagrama do modelo e os expoentes críticos  $z$  e  $\nu$ . Comparamos nossos resultados com cálculos analíticos de outros trabalhos como mostrado na figura 4.1.

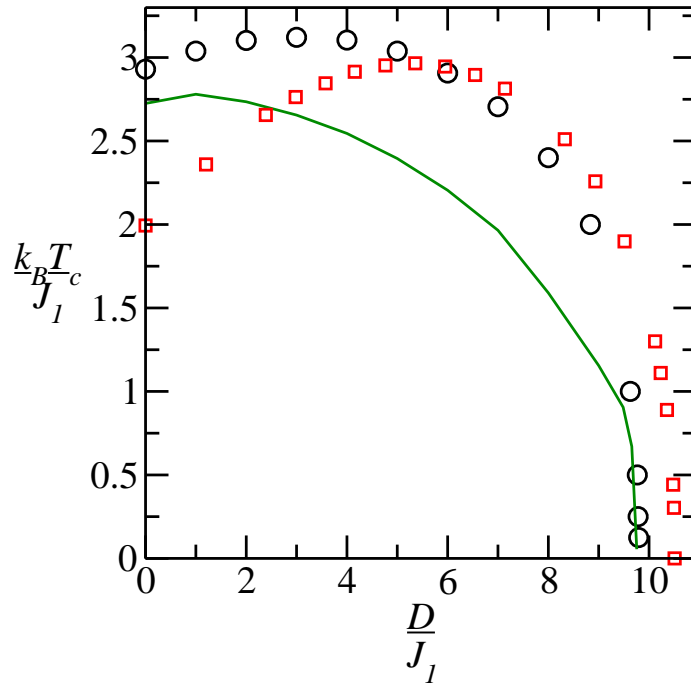


Figura 4.1: Resultados para  $\alpha = \frac{J_2}{J_1} = 1.0$ . Diagrama de fase para o modelo XY tridimensional com  $S = 1$  e anisotropia de plano-fácil. A linha sólida é o resultado obtido por Pires e Costa [1], utilizando aproximação harmônica auto consistente, SCHA. Os quadrados indicam os resultados de Wang e Wang [4] que utilizaram o método operador de ligação. Os círculos abertos são os pontos de temperatura crítica obtidos neste trabalho após aplicar escala de tamanho finito nos resultados da rigidez de spin ( $\rho_s$ ) obtidos pelo método de Monte Carlo Quântico com expansão em série estocástica.

Analisando a Fig. 4.1 podemos ver que a "corcunda" observada no gráfico não é um

artifício criado por um método específico. Além de vários autores terem observado essa "corcunda" utilizando diferentes métodos, o resultado numérico deste trabalho verifica esse comportamento. Podemos entender isso, se analisarmos a temperatura crítica de um sistema  $XY$  clássico. Para  $D$  pequeno a temperatura crítica é determinada pelas interações de troca. À medida que  $D$  aumenta, o comportamento do sistema se aproxima do rotor planar, que por sua vez possui uma temperatura crítica maior que a do modelo  $XY$ . Voltando ao sistema quântico, podemos ver que nesse regime as flutuações térmicas dominam as flutuações quânticas, porém um aumento ainda maior no valor de  $D$  reduz a temperatura crítica devido ao aumento das flutuações quânticas.

## 4.2 Construção do Diagrama de fase

### 4.2.1 Anisotropia $D$ pequena

Para a construção do diagrama de fase, utilizamos principalmente o comportamento de tamanho finito da rigidez de spin próximo do ponto crítico. Utilizando relações gerais de escala, observa-se que o comportamento assintótico da rigidez de spin  $\rho_s$  em função do tamanho de rede  $L$  próximo do ponto crítico  $T_c$  é dado por[49]:

$$\rho_s(L, t) = L^{2-d} F_\rho(tL^{\frac{1}{\nu}}), \quad (4.1)$$

onde  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$  é a temperatura reduzida. Esta equação pode ser obtida a partir de

$$\rho_s(b, t) = b^{2-d} F_\rho(tb^{\frac{1}{\nu}}), \quad (3.98)$$

para  $b = L$ . De acordo com a Eq. (4.1) espera-se que as curvas de  $L\rho_s(T, L) \times T$  se interceptem em um ponto fixo  $L\rho_s(L, T_c) = F_\rho(0)$ .

A Eq. (4.1) é válida no regime assintótico ( $L \rightarrow \infty$ ). Para redes pequenas, correções à escala podem ser necessárias[49]. Na Fig 4.2, para  $\alpha = \frac{J_2}{J_1} = 1$  e  $D = 0$ , podemos observar o cruzamento para diferentes tamanhos de rede  $L \in [4, 6, 8, 10, 12, 16]$ . Estimamos o valor do ponto crítico  $T_c$  através do cruzamento entre as curvas  $\rho_s(16, t)16$  e  $\rho_s(12, t)12$ , do qual obtemos  $T_c(16, 12) = 2.928$ . O erro da estimativa é dado pela diferença do cruzamento entre  $\rho_s(16, t)16$  e  $\rho_s(4, t)4$ , do qual obtemos  $T_c(16, 4) = 2.93$ . Logo  $T_c = 2.928 \pm 0.002$  para anisotropia  $D = 0$ . Para o colapso das curvas, variamos o valor de  $\nu$  de modo a achar a curva (ajuste cúbico) que melhor se encaixasse com os dados (menor resíduo) na região  $t > 0$ . A incerteza é estimada pelo valor de  $\nu$  que resulta em até 10% acima do menor resíduo. Repetimos esse processo para outros valores de  $D$  até próximo do valor crítico

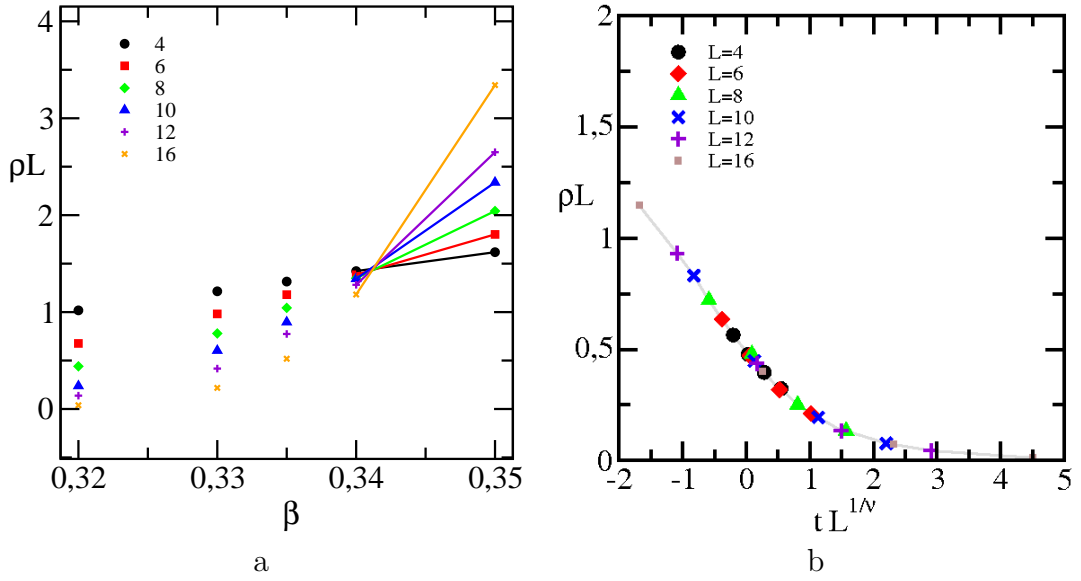


Figura 4.2: Resultados para  $\alpha = \frac{J_2}{J_1} = 1$  e  $D = 0$ . (a) Curvas de  $L\rho_s$  em função da temperatura inversa  $\beta = \frac{1}{T}$  para diferentes tamanhos de rede  $L$ . As curvas cruzam-se (asintoticamente para  $L$  grande) na temperatura crítica  $T_c = 2.93$ . (b) Melhor colapso das curvas de  $\rho_s L$  por  $tL^{\frac{1}{\nu}}$  onde  $t = \frac{T}{T_c} - 1$  é a temperatura reduzida. Melhor colapso obtido com  $\nu = 0.66(2)$  e utilizando  $T_c$  obtido em (a).

$D_c$ . O valor encontrado  $\nu = 0.66(2)$  pelo colapso da curva na Fig. 4.3 (b) é consistente

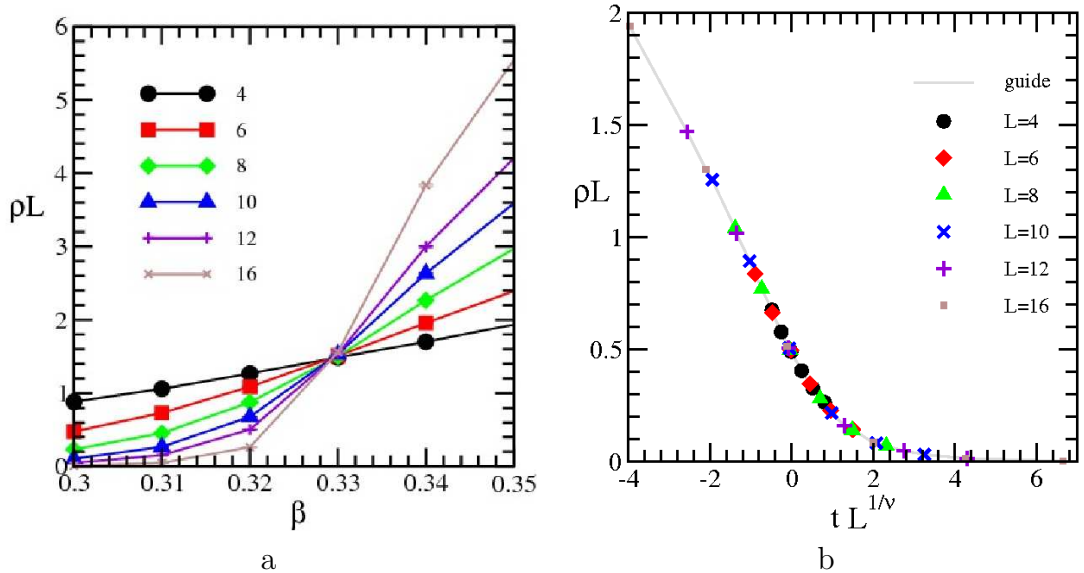


Figura 4.3: Resultados para  $\alpha = \frac{J_2}{J_1} = 1$  e  $D = 1$  (a) Curvas de  $L\rho_s$  em função da temperatura inversa  $\beta = \frac{1}{T}$  para diferentes tamanhos de rede  $L$ . As curvas cruzam-se (asintoticamente para  $L$  grande) na temperatura crítica  $T_c = 3.04$ . (b) Melhor colapso das curvas de  $\rho_s L$  por  $tL^{\frac{1}{\nu}}$  onde  $t = \frac{T}{T_c} - 1$  é a temperatura reduzida. Melhor colapso obtido com  $\nu = 0.66(2)$  e utilizando  $T_c$  obtido em (a).

com o valor de  $\nu$  para classe de universalidade do modelo  $XY$  tridimensional [2].

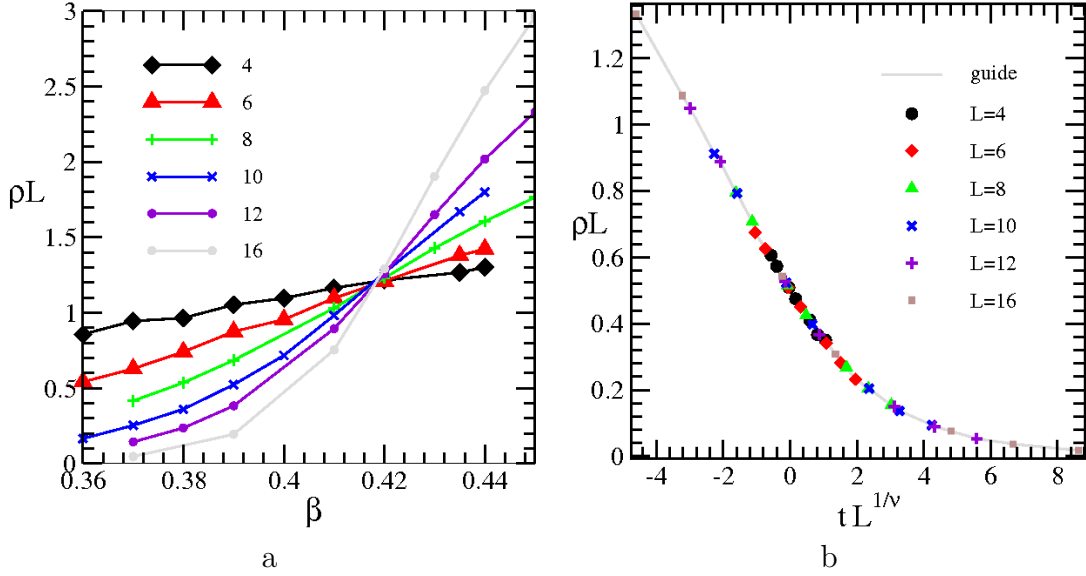


Figura 4.4: Resultados para  $\alpha = \frac{J_2}{J_1} = 1$  e  $D = 8$  (a) Curvas de  $L\rho_s$  em função da temperatura inversa  $\beta = \frac{1}{T}$  para diferentes tamanhos de rede  $L$ . As curvas cruzam-se (asintoticamente para  $L$  grande) na temperatura crítica  $T_c = 2.39$ . (b) Melhor colapso das curvas de  $\rho_s L$  por  $tL^{\frac{1}{\nu}}$  onde  $t = \frac{T}{T_c} - 1$  é a temperatura reduzida. Melhor colapso obtido com  $\nu = 0.66(2)$  e utilizando  $T_c$  obtido em (a).

## 4.3 Anisotropia e expoentes críticos

### 4.3.1 Anisotropia crítica $D_c$

Ao aumentarmos o valor da anisotropia  $D$ , as flutuações quânticas ficam cada vez mais significativas. Logo, relações de escala mais adequadas para a rigidez de spin e para susceptibilidade magnética uniforme devem ser usadas para obter o valor crítico  $D_c$  [50]:

$$\rho_s = \frac{T}{L^{d-2}} F_\rho(cTL^z, gL^{\frac{1}{\nu}}), \quad (4.2)$$

$$\chi = \frac{1}{TL^d} F_\chi(cTL^z, gL^{\frac{1}{\nu}}), \quad (4.3)$$

onde  $g = \frac{D}{D_c} - 1$  é a anisotropia "reduzida",  $c$  é uma constante e  $z$  é expoente dinâmico crítico. Estas relações de escalas são mais difíceis de trabalhar porque temos duas variáveis de escala independentes ( $L^z T$  e  $gL^{\frac{1}{\nu}}$ ). A relação para  $\rho_s$  pode ser obtida a partir das Eqs. (3.101, 3.94). Uma maneira de reduzir o número de variáveis é observando as relações de escala em temperaturas baixas o suficiente ( $T \ll \frac{1}{cL^z}$ ). Desta forma, o primeiro

argumento da função de escala se torna constante ( $TcL^z \approx 0$ ) e pode ser desconsiderado de forma que a relação de escala se reduz a:

$$\rho \frac{L^{d-2}}{T} = F_\rho(0, gL^{\frac{1}{\nu}}). \quad (4.4)$$

A vantagem dessa abordagem é que o expoente dinâmico crítico  $z$  não precisa ser previamente conhecido para estimar a anisotropia crítica. Neste caso, temos que no ponto crítico ( $g = 0$ ) as curvas  $\frac{\rho_s L}{T} \times D$  para uma mesma temperatura  $T$  para tamanhos de rede  $L$  diferentes cruzam-se no mesmo ponto  $F_\rho(0, 0)$ , ou seja,

$$\rho \frac{L^{d-2}}{T} = F_\rho(0, 0). \quad (4.5)$$

Os resultados para  $\alpha = 1$  e temperaturas  $T = 0.250$  e  $T = 0.125$ , podem ser vistos na Fig. 4.5. Na tabela 4.1 podemos observar que a influência devido ao tamanho finito  $L$  é mais significativa do que devido a  $\beta$  finito. Os cruzamentos entre curvas de  $\rho_s L$  para diferentes temperaturas e tamanho de rede  $L$  estão resumidos na tabela abaixo.

T	L(6, 10)	L(8, 10)	L(12, 16)
0.250	9.720(7)	9.744(16)	9.776(9)
0.125	9.708(4)	9.740(11)	9.778(7)

Tabela 4.1: Cruzamento de curvas  $\rho L \times D$  para tamanhos de rede  $L$  diferentes. Uma estimativa para  $D_c$  é obtida para cada cruzamento em duas temperaturas diferentes  $T = 0.125$  e  $T = 0.250$ .

### 4.3.2 Expoente dinâmico crítico

Como pode ser visto no apêndice A, o mapeamento de um sistema quântico para um clássico correspondente relaciona a temperatura inversa ( $\beta = \frac{1}{T}$ ) com uma dimensão temporal imaginária  $L_\tau \propto \beta$  [51]. Como tempo e espaço não são equivalentes, temos dois "comprimentos" de correlação: um espacial  $\xi$  e um temporal  $\xi_\tau$ . Estes são conectados através do expoente dinâmico crítico  $z$ :  $\xi_\tau \propto \xi^z$ .

Quando avaliado no ponto crítico  $g = 0$  a Eq. (4.2) se reduz a

$$\rho \frac{L^{d-2}}{T} = F_\rho(L^z T, 0), \quad (4.6)$$

portanto, se  $D_c$  é conhecido, o expoente dinâmico crítico  $z$  pode ser estimado através do colapso das curvas de rigidez de spin  $\frac{\rho L}{T}$  em função  $L^z T$ .



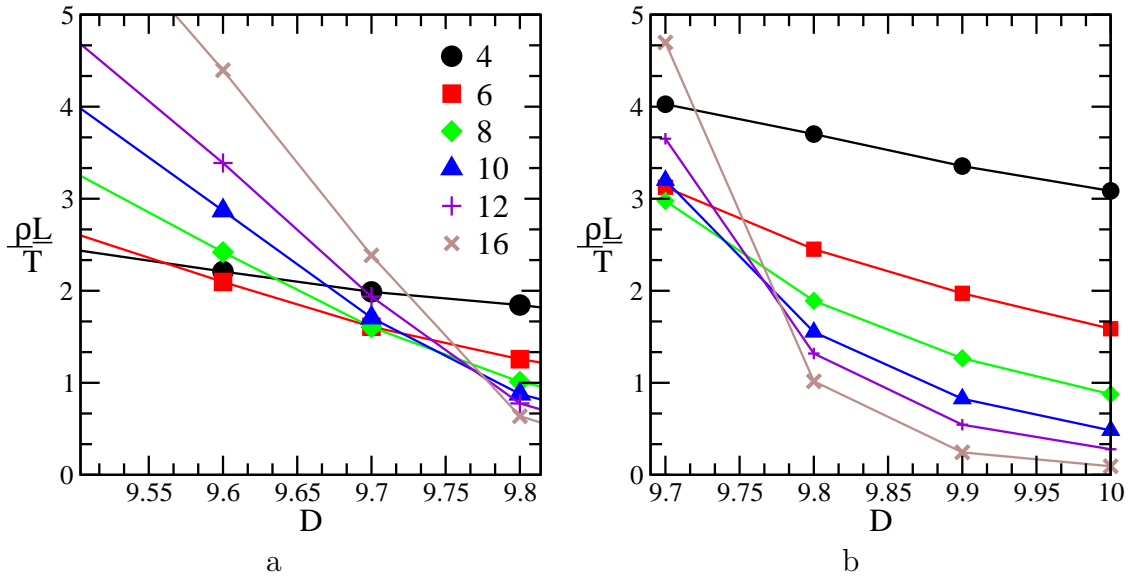


Figura 4.5: Curvas de  $L^2 \rho_s$  como função da anisotropia  $D$  cruzam-se (asintoticamente para  $L$  grande) na anisotropia crítica  $D_c$  (a) Para  $T = 0.250$ , (b) para  $T = 0.125$ .

Na seção anterior obtivemos uma estimativa para o valor  $D_c \approx 9.8(1)$  como visto na tabela 4.1. Dessa forma, podemos utilizar esse valor  $D_c$  para obter o expoente crítico  $z$ . A Fig. 4.6 ilustra o melhor colapso obtido ao variarmos os valores de  $z$ . O critério de melhor ajuste é dado pelo valor de  $z$  que produz o menor resíduo entre o polinômio cúbico e a curva  $\ln(\frac{\rho_s L}{T})$  por  $TL^z$  obtida pelos dados da simulação. A incerteza em  $z$  é estimada para os valores de  $z$  que produzem um resíduo até 10% acima do resíduo mínimo. Para  $\alpha = 1.0$  o melhor ajuste foi encontrado para  $D_c = 9.8$  e  $z = 0.76(12)$ , enquanto que para  $\alpha = 0.5$  o melhor ajuste se dá por  $D_c = 8.0$  e  $z = 0.70(3)$ . Um valor de  $z < 1$  não fornece o comportamento assintótico correto, possivelmente devido à correções de escala. Acreditamos que ao simular redes maiores ou se fossem consideradas as correções, obteríamos o valor teórico  $z = 1$  dado pela dispersão  $w_k \propto k$  para  $k$  pequeno [1]. Podemos ver na Fig. 4.7 que a região mais afetada por essas possíveis correções, são para baixa temperatura ou pequeno tamanho de rede  $L$  no qual o colapso de curvas para susceptibilidade não fornece bons resultados utilizando  $z = 1$ .

Embora seja possível estimar o valor de  $D_c$  utilizando baixas temperaturas, não é possível estimar o valor de  $\nu$  da mesma maneira. A influência de tamanho finito depende do menor comprimento do sistema. Uma vez que um "comprimento" de correlação atinge o tamanho do sistema em uma dada direção, o comportamento do sistema fica fortemente influenciado por essa escala, de forma que a relação  $\xi_\tau \propto \xi^z$  não pode ser mais aplicada. Ao tentar ajustar  $\nu$  utilizando a Eq. (4.4) encontramos colapsos razoáveis para um intervalo

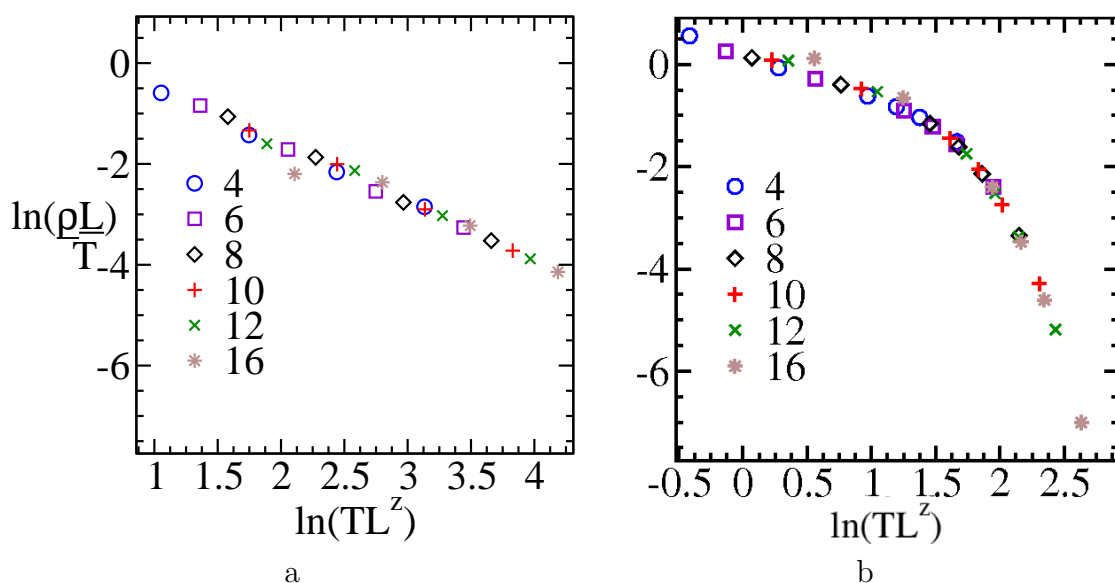


Figura 4.6: Gráfico em escala logarítmica do colapso da curva de  $\rho L \times TL^z$  de acordo com a eq. 4.6. O melhor colapso para as curvas foi obtido para (a)  $\alpha = 1.0, D_c = 9.8, z = 0.76(12)$ , (b)  $\alpha = 0.5, D_c = 8.0, z = 0.70(3)$ .

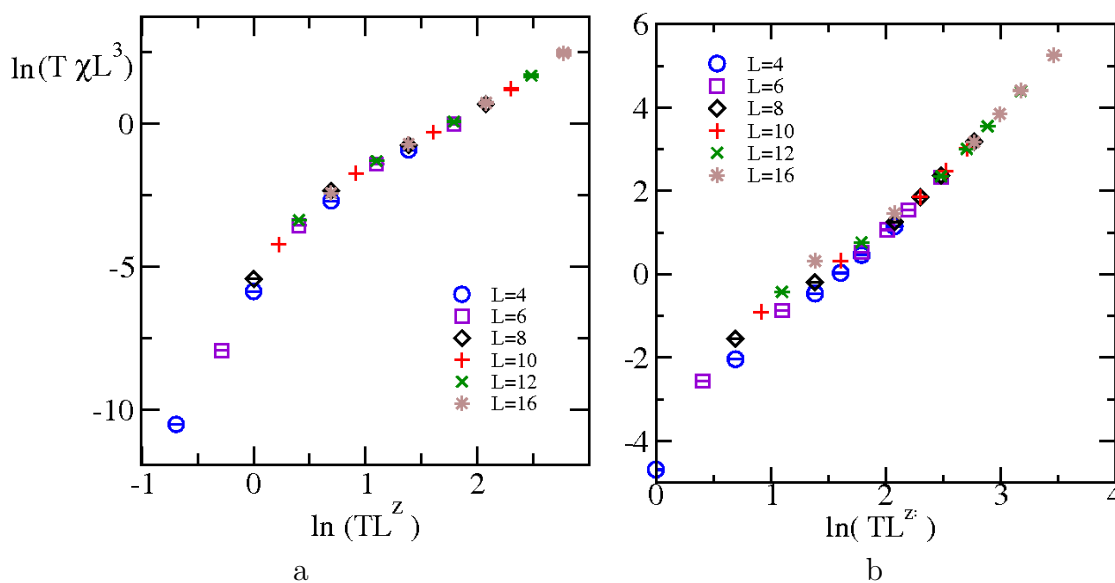


Figura 4.7: Gráfico em escala logarítmica do colapso da curva de susceptibilidade ( $\chi$ ) assumindo  $z = 1$ , (a) para  $\alpha = 1.0$  e  $D_c = 9.8$ , (b) para  $\alpha = 0.5$  e  $D_c = 8.0$ .

ampla de valores  $\nu \in [0.5, 0.7]$  com  $D_C = 9.78$ . O resultado para  $T = 0.250$  e  $T = 0.125$  pode ser visto nas Figs. 4.8 e 4.9.

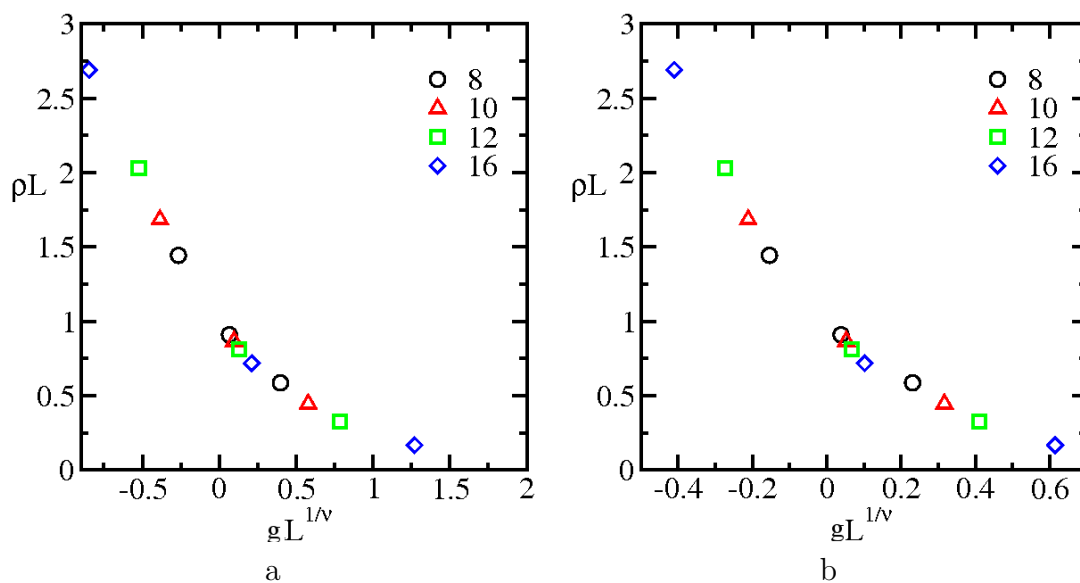


Figura 4.8: Colapso de curvas de acordo com a Eq. (4.4) com  $D_c = 9.78$  e  $T = 0.250$ . Melhores colapsos encontrados (a)  $\nu = 0.60$  e (b)  $\nu = 0.71$ .

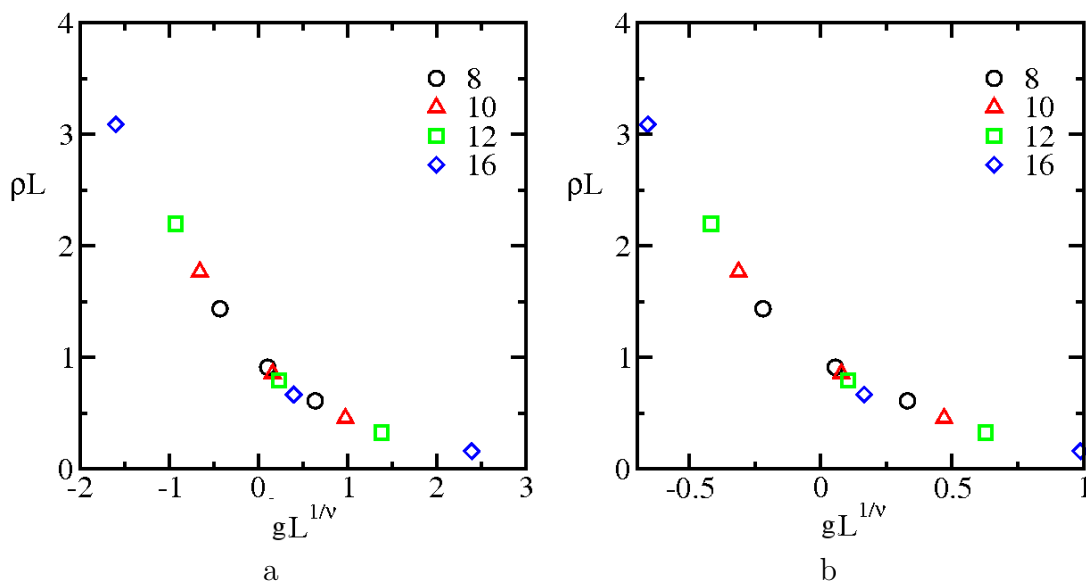


Figura 4.9: Colapso de curvas de acordo com a Eq. (4.4) com  $D_c = 9.78$  e  $T = 0.125$ . Melhores colapsos encontrados (a)  $\nu = 0.52$  e (b)  $\nu = 0.63$ .

### 4.3.3 Escala com razão de aspecto constante

A dificuldade de escala observada na seção anterior, é normalmente encontrada em sistemas clássicos com redes não-cúbicas nos quais uma dimensão é muito maior do que a outra. Uma maneira de contornar esse problema é usando uma razão de aspecto constante

R	L(4, 8)	L(8, 10)	L(6, 12)	L(10, 12)	L(4, 16)	L(8, 16)	L(14, 16)
2	9.811(5)	9.806(2)	9.802(2)	9.794(3)	9.7985(5)	9.792(5)	9.77(3)
1	9.807(5)	9.800(5)	9.800(6)	9.797(7)	9.797(6)	9.796(7)	9.795(7)

Tabela 4.2: Cruzamento de curvas  $\rho L^2 \times D$  para tamanhos de rede  $L$  diferentes. Uma estimativa para  $D_c$  é obtida para cada cruzamento em duas razões de aspecto diferentes  $R = 2$  e  $R = 1$ , assumindo  $z = 1$ .

$\frac{L^z}{L_\tau} = R = TL^z$  ou  $\frac{1}{T} \propto L_\tau = \frac{L^z}{R}$ . Dessa forma a Eq. (4.2) se reduz a:

$$\rho_s = \frac{1}{L_\tau L^{d-2}} f_\rho(const, gL^{\frac{1}{\nu}}), \quad (4.7)$$

ou, finalmente,

$$\rho_s L^{d+z-2} = R f_\rho(gL^{\frac{1}{\nu}}). \quad (4.8)$$

Quando  $\xi \gg L$  ou  $\xi_\tau \gg L_\tau$  temos que as correlações são limitadas pelo tamanho finito do sistema. Logo, utilizando a Eq. (4.8) obtemos um resultado mais preciso do que ao usar a Eq. (4.4). Isso ocorre porque evitamos que o comportamento mude entre esses dois regimes ( $\xi_\tau \gg L_\tau$ ,  $\xi_\tau \ll L_\tau$ ), mesmo ao alterar a temperatura do sistema, uma vez que essa mudança ocorre em temperaturas diferentes para tamanhos de rede diferentes, mantendo o argumento de escala constante. A escala de tamanho finito pode ser usada no regime quando o comprimento de correlação é muito maior que o tamanho do sistema. Logo, devemos obter uma razão de aspecto no qual o sistema se encontre nesse regime. Uma condição para garantir que estamos no regime correto é que o resultado simulado em uma dada razão não seja significativamente diferente de um resultado utilizando a metade dessa mesma razão. Na Fig. 4.10 temos o resultado para  $R = TL = 2$ ,  $R = 1$ , considerando  $z = 1$ . Para melhor comparação, os resultados dos cruzamentos estão disponibilizados na tabela abaixo. Nesta, vemos que a redução da razão de aspecto de 2 para 1 não tem um efeito significativo no ponto de cruzamento. Desta forma, podemos utilizar a razão de aspecto que requer menor esforço computacional ( $R = 2$ ) ao estender a simulação para redes maiores ( $L \in [20, 22, 24]$ ).

Na Fig. 4.10 pode-se notar que os três cruzamentos entre as curvas com maiores tamanhos de rede ( $L \in [20, 22, 24]$ ) estão próximos do mesmo ponto. A média dos pontos obtidos por esses cruzamentos (20, 22, 24) nos fornece uma estimativa para a anisotropia crítica  $D_c$ . Repetindo esse procedimento para quatro realizações independentes, isto é, quatro simulações utilizando os mesmos parâmetros mas com diferentes sementes iniciais do gerador de número aleatório, obtemos o valor médio  $D_c = 9.7945(5)$ .

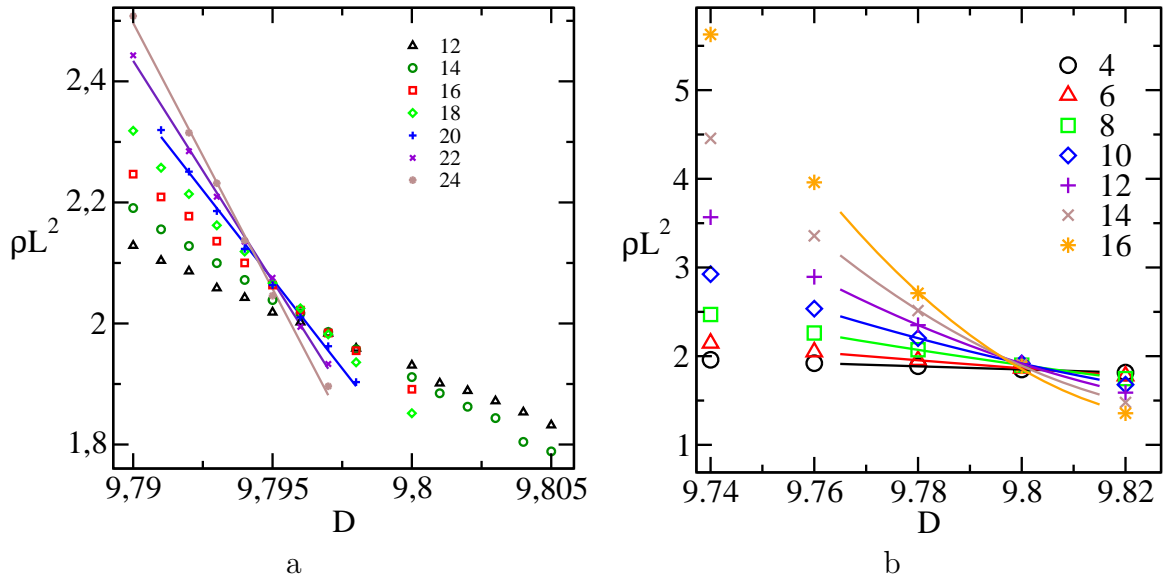


Figura 4.10: Curvas de  $L^2 \rho_s$  como função da anisotropia  $D$  cruzam-se no ponto  $D_c$ .  $R = TL$  (a)  $D_c = 9.795$ ,  $R = 2$  (b)  $D_c = 9.796$ ,  $R = 1$ .

Comparando o resultado da Fig. 4.5 com os resultados da Fig. 4.10, vemos que o último produz cruzamentos mais próximos de um ponto fixo do que o primeiro. Isso se deve a desvios devido a temperatura finita que foram desconsiderados ao assumir  $cTL^z \approx 0$ .

Também podemos observar que a tendência dos cruzamentos na tabela 4.1 convergem de forma crescente com o tamanho de rede para  $D_c = 9.78$ , enquanto na tabela 4.2 vemos uma convergência decrescente para  $D_c = 9.795$ , o que indica que o valor de  $D_c$  está entre esses dois valores.

Mesmo utilizando uma razão de aspecto constante, não foi possível melhorar muito a incerteza na estimativa de  $\nu$  como pode ser visto na Fig. 4.11. Na seção seguinte, o expoente crítico  $\nu$  é calculado considerando correções de escala de forma a sanar esse problema.

#### 4.3.4 Correções de escala

Uma estimativa precisa de  $D_c$  e  $\nu$ , normalmente pode ser obtida através do colapso das curvas da rigidez de spin através de uma correção da equação 4.8. O ansatz usual é dado por [52, 53]:

$$N(L) = 1 + cL^{-w}, \quad (4.9)$$

entretanto no sistema quântico  $d + 1 = 4$  correções logarítmicas podem aparecer[7] e neste caso, o ajuste se torna ineficaz para tamanhos de rede  $L$  pequenos. A equação de escala

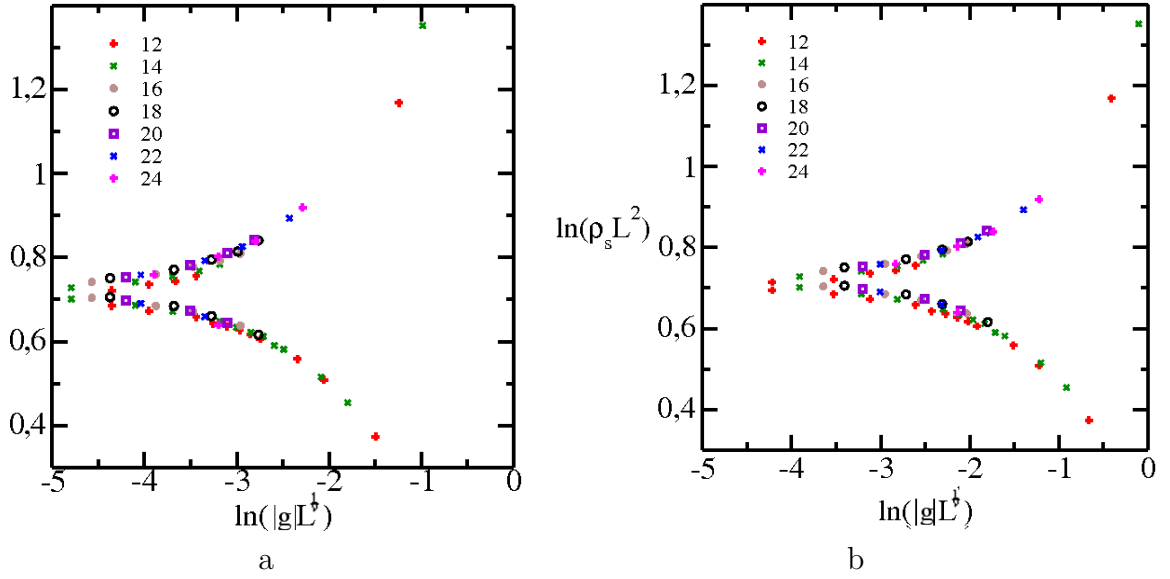


Figura 4.11: Colapso da rigidez de spin de acordo com a hipótese de escala da Eq. (4.8) com  $TL = 2$  para  $\alpha = 1.0$ . Colapsos razoáveis podem ser vistos para um intervalo razoável de  $\nu$  com  $D_c = 9.795$ , (a)  $\nu = 0.6$  e (b)  $\nu = 0.5$ .

da rigidez de spin com correções é dada por :

$$\rho L^{d+z-2} = N(L)F_\rho(gL^{\frac{1}{\nu}}) \quad (4.10)$$

Qualquer tentativa de ajustar os resultados a Eq. (4.9) ou a outro ansatz [54] foi improdutivo, gerando barras de erros grandes nos expoentes críticos. Por exemplo, o expoente  $\nu$  ajustou bem para  $\nu \in (0.5, 0.6)$  com  $D_c \in (9.78, 9.8)$  para um intervalo grande de valores de  $w$ , sem nenhuma vantagem em comparação a  $N(L) = 1$  como pode ser visto na figura 4.11. Um ajuste logarítimo necessitaria de sistemas com tamanhos de rede  $L$  muito maiores do que simulados nesse trabalho.

É possível manipular a Eq. (4.10) para realização de um colapso independente da forma de  $N(L)$ . Suponha que a função de escala  $F_\rho$  em 4.10 admita uma expansão em série em torno de  $g = 1 - \frac{D}{D_c} \approx 0$ ,

$$\rho_s(L, g)L^{d+z-2} = N(L)(F_\rho(0) + F'_\rho(0)gL^{\frac{1}{\nu}} + O(g^2)), \quad (4.11)$$

$$= A(L) + B(L)t, \quad (4.12)$$

na qual

$$A(L) = N(L)F_\rho(0), \quad (4.13)$$

$$B(L) = N(L)F'_\rho(0)L^{\frac{1}{\nu}}. \quad (4.14)$$

Realizando um ajuste polinomial em um gráfico  $\rho L^{d+z-2} \times g$ , é possível obter o termo independente, já que para  $g = 0$ , temos  $\rho(L, 0)L^{d+z-2} = A(L)$ . A ordem do polinômio usado depende do intervalo de valores de  $D$  (usualmente linear, para um pequeno intervalo). A dependência  $N(L)$  pode ser então eliminada ao dividir  $\rho L^{d+z-2}$  por  $A(L)$ , ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{\rho_s(L, g)L^{d+z-2}}{A(L)} &= \frac{\rho_s(L, g)L^{d+z-2}}{\rho_s(L, 0)L^{d+z-2}}, \\ &= \frac{\rho_s(L, g)}{\rho(L, 0)}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$\approx 1 + \frac{F'_\rho(0)}{F_\rho(0)}gL^{\frac{1}{\nu}} + O(g^2). \quad (4.16)$$

Um exemplo dessa eliminação pode ser vista na figura 4.12, na qual a regressão linear  $Y = A + Bx$  é realizada para as curvas (a)  $\rho_s(8, g)8^2$  por  $g$ ;  $A = 15.571$  e (b)  $\rho_s(16, g)16^2$  por  $g$ ;  $A = 33.314$ .

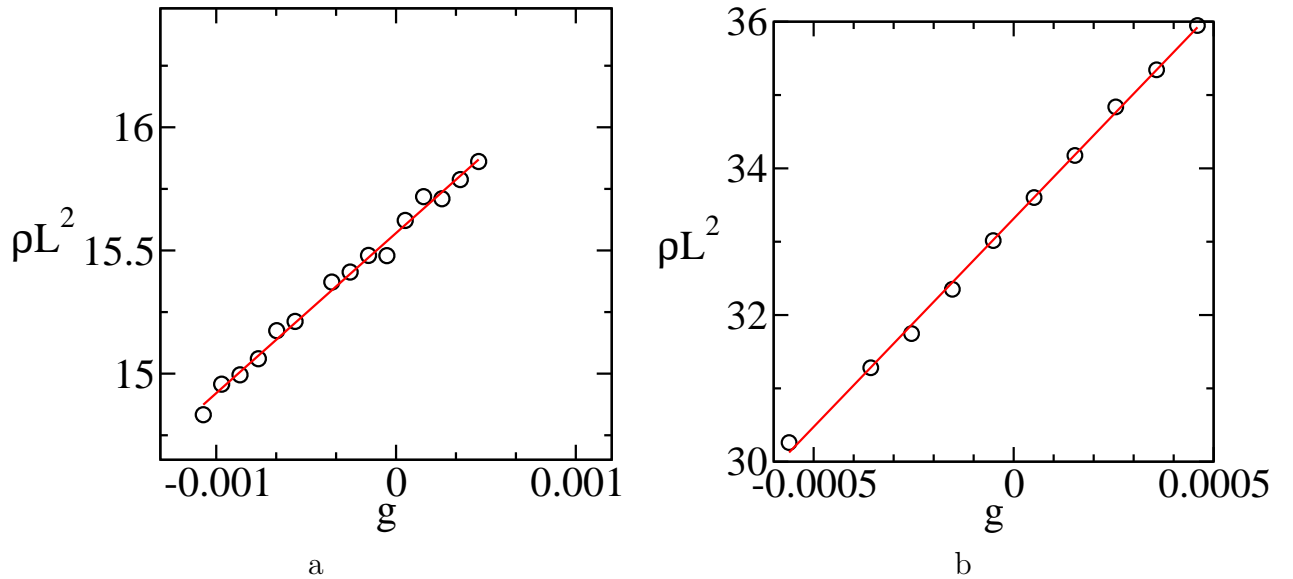


Figura 4.12: Curvas  $\rho_s(L, g)L^2$  por  $g$  e respectivas regressões lineares  $Y = A + Bx$  para (a)  $L = 8$  e  $A = 15.571$  e (b)  $L = 16$  e  $A = 33.314$ .

Na figura 4.13 (b) podemos ver as curvas normalizadas  $\frac{\rho_s(L, g)L^{d+z-2}}{A(L)}$  para  $L = 8$  representado por quadrados e para  $L = 16$  representado por asterisco. Fica claro que quanto maior  $L$  maior a inclinação, já que:

$$\frac{B(L)}{A(L)} = \frac{F'_\rho(0)}{F_\rho(0)}L^{\frac{1}{\nu}}. \quad (4.17)$$

Portanto, se utilizarmos valores apropriados de  $\nu$  e  $D_c$  para diferentes  $L$  em um gráfico

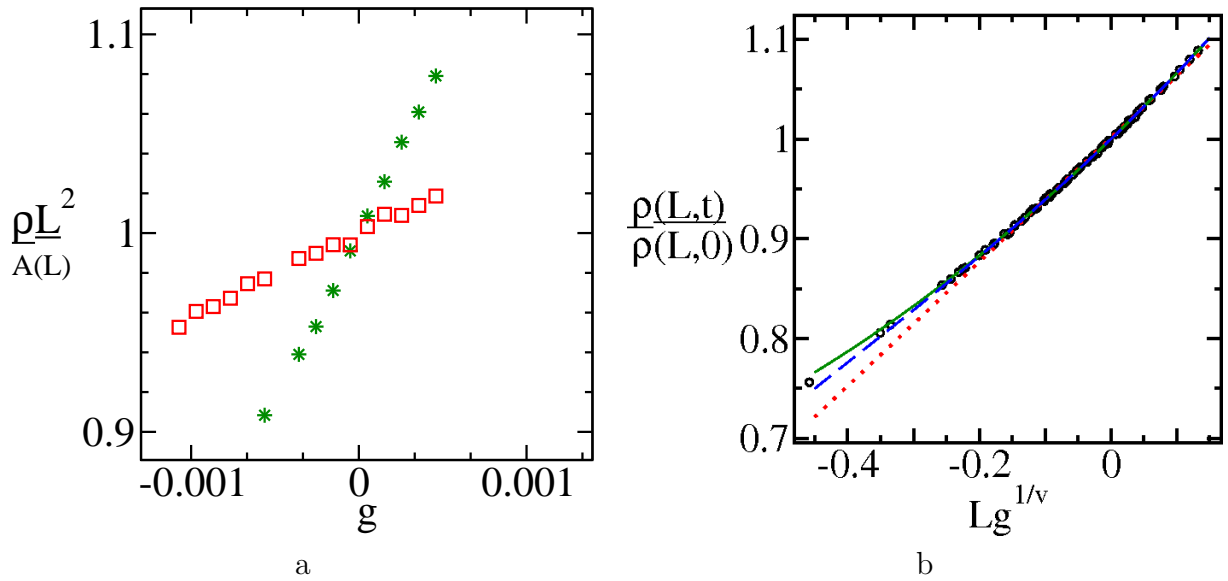


Figura 4.13: (a) Curvas normalizadas  $\frac{\rho_s(L,g)L^{d+z-2}}{A(L)}$  para  $L = 8$  representado por quadrados e para  $L = 16$  representado por asteriscos. (b) Os valores e incertezas de  $\nu$  e  $D_c$  dependem do polinômio de ordem  $n$  que melhor se ajuste aos dados. Em (b) os polinômios são ajustando no intervalo  $g \in [-0.15, 0.15]$ . O de ordem  $n = 1$  é representado pela linha pontilhada,  $n = 2$  pela linha sólida e  $n = 3$  pela linha tracejada.

de  $\frac{\rho(L,t)}{\rho(L,0)} \times gL^{\frac{1}{\nu}}$ , obteremos o colapso dos dados em uma única curva. Esse resultado pode ser visto na Fig. 4.14.

Os valores e incertezas de  $\nu$  e  $D_c$  envolvidas no colapso foram calculadas utilizando dois métodos:

1. A primeira estimativa é realizada ao obter o resíduo de um ajuste polinomial de ordem  $n$  aos dados da rigidez de spin das maiores redes simuladas  $L \in [12, 24]$ . A ordem  $n$  do polinômio usado depende do intervalo de valores usado, no caso  $n = 3$  para  $D \in [9.787, 9.810]$  (ver figura 4.9 b). A estimativa de  $\nu$  e  $D_c$  é dada pelos valores que produzem o menor resíduo. O resultado final é dado pela média obtida de quatro realizações independentes. Este procedimento fornece o seguinte resultado  $D_c \in [9.7912, 9.7924]$  e  $\nu \in [0.485, 0.493]$ . A partir de um cálculo similar utilizando a susceptibilidade magnética uniforme (ver apêndice B) obtém-se  $D_c \in [9.7870, 9.7910]$  e  $\nu \in [0.505, 0.523]$ .

A primeira estimativa é dada por:

$$D_c = 9.7918(6) \quad \nu = 0.488(4),$$

$$D_c = 9.789(2) \quad \nu = 0.514(9),.$$



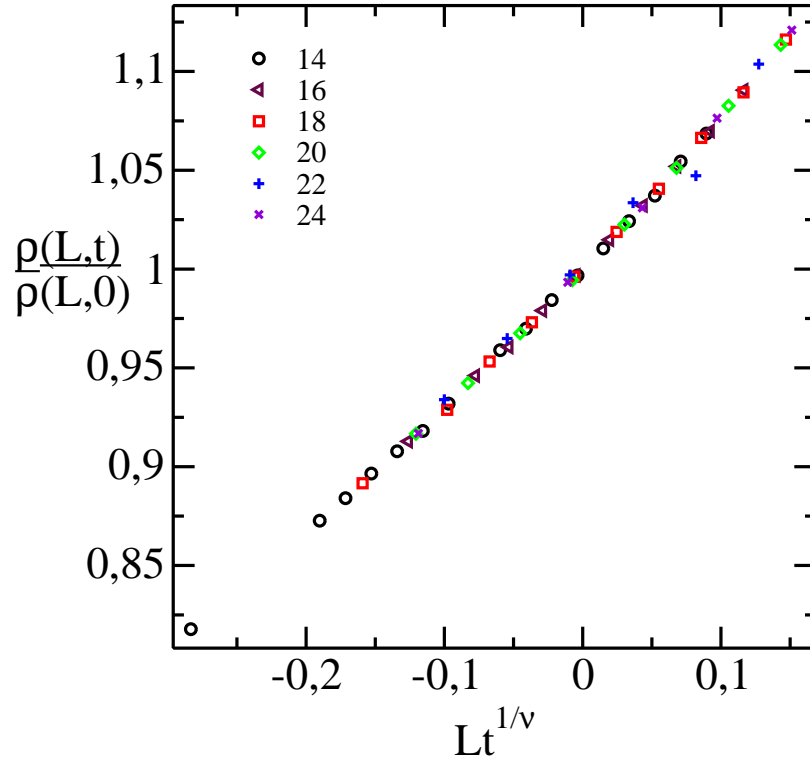


Figura 4.14: O colapso da curva da rigidez de spin foi obtido para diversas tamanhos de redes utilizando os valores  $\nu = 0.501(5)$  e  $D_c = 9.7948(3)$  os quais produziram o menor erro de  $\nu$  quando avaliado pela Eq. (4.20).

2. O segundo método depende de uma relação direta para estimativa de  $\nu$  dependente de  $D_c$ . A estimativa para as duas quantidades será dada para o valor de  $D_c$  que produza a menor incerteza em  $\nu$ . Esta relação será deduzida a seguir.

Observando a eq. 4.12 pode-se esperar que a inclinação de  $\rho L^{d+z-2}$  tenha a seguinte dependência com tamanho de rede  $L$ :

$$\left. \frac{\partial \rho(L, g)}{\partial g} \right|_{g=0} L^{d+z-2} = N(L) F'_\rho L^{\frac{1}{\nu}} = B(L). \quad (4.18)$$

Pode-se tomar o logarítmo da equação anterior para encontrar:

$$(d+z-2)\ln(L) + \ln\left(\left. \frac{\partial \rho(L, g)}{\partial g} \right|_{g=0}\right) = \ln(N(L)) + \ln(L)\frac{1}{\nu}.$$

Subtraindo a última equação para tamanhos de rede  $L, L'$  diferentes, obtém-se

$$(d+z-2)\left(\ln\left(\frac{L}{L'}\right) + \ln\left(\frac{\left.\frac{\partial\rho(L,g)}{\partial g}\right|_{g=0}}{\left.\frac{\partial\rho(L',g)}{\partial g}\right|_{g=0}}\right)\right) \\ \approx \ln\left(\frac{N(L)}{N(L')}\right) + \ln\left(\frac{L}{L'}\right)\frac{1}{\nu}.$$

Isolando  $\nu$  e assumindo  $z = 1$  obtém-se  $\nu$  de forma similar a Ref.[2]:

$$\nu(L, L') = \frac{\ln(L) - \ln(L')}{\ln\left(L^2 \left.\frac{\partial\rho(L,g)N(L')}{\partial g}\right|_{g=0}\right) - \ln\left(L'^2 \left.\frac{\partial\rho(L',g)N(L)}{\partial g}\right|_{g=0}\right)}, \quad (4.19)$$

que pode ser reescrita em termos de  $A(L)$  e  $B(L)$  como:

$$\nu(L, L') = \frac{\ln(L) - \ln(L')}{\ln(B(L)A(L')) - \ln(B(L')A(L))}. \quad (4.20)$$

O melhor colapso é então definido pelos valores de  $\nu$  e  $D_c$  que produzem o menor desvio de  $\nu$  obtidos pelos pares  $(L, L')$  das maiores redes simuladas  $L \in [12, 24]$ . Novamente o resultado é dado pelo valor médio de quatro realizações independentes. Utilizando esse critério obtém-se  $D_c \in [9.79435, 9.79515]$  e  $\nu \in [0.496, 0.506]$  através dos dados de rigidez de spin e também  $D_c \in [9.7935, 9.7946]$  e  $\nu \in [0.47, 0.51]$  pelo resultado da susceptibilidade magnética uniforme utilizando uma relação semelhante para  $\nu$  (B.8).

A segunda estimativa é dada por:

$$D_c = 9.7948(4) \quad \nu = 0.501(5), \\ D_c = 9.7941(5) \quad \nu = 0.49(2),$$

usando a rigidez de spin e susceptibilidade respectivamente.

Como o número de ajustes no segundo método é menor do que no primeiro, consideramos o segundo menos propenso a erros sistemáticos e portanto o resultado final será dado pela média entre estas duas últimas estimativas (rigidez de spin e susceptibilidade). Para  $\alpha = 1.0$  obtivemos o valor final  $D_c = 9.7945(9)$ . Este valor é consistente com o valor encontrado por Pires e Costa[1] no qual  $D_c = 9.77$  (SCHA) e difere significativamente do resultado de Wang e Wang [4] que obtiveram o valor  $D_c = 10.481$  pelo método de operadores de ligação. Apesar do método de operadores de ligação ser mais apropriado no limite  $D$  grande do que o método SCHA, esse se baseia em uma aproximação de campo médio

dos operadores de bóson. O método SCHA utilizado, por sua vez, levou em consideração renormalizações térmicas e quânticas, o que pode ter favorecido o resultado próximo ao deste trabalho.

### 4.3.5 Anisotropia crítica $D_c$ em função de $\alpha$

Um valor aproximado para anisotropia crítica  $D_c$  em função de  $\alpha$  pode ser visto na Fig. 4.15. Cada  $D_c(\alpha)$  foi obtido pelo cruzamento de  $\rho L^2 \times D$  de acordo com a Eq. (4.8) para duas redes de tamanho 14 e 16. A Eq. (4.8) fornece valores razoáveis para  $D_c$  e portanto não há necessidade de utilizar correções de escala porque não será calculado o expoente crítico de cada  $\alpha$ . Os erros estatísticos são menores que os erros sistemáticos devido ao tamanho finito. Logo, as barras de erros foram estimadas pela diferença entre o cruzamento das curvas com menores (4,6) e maiores (14,16) tamanhos de rede.

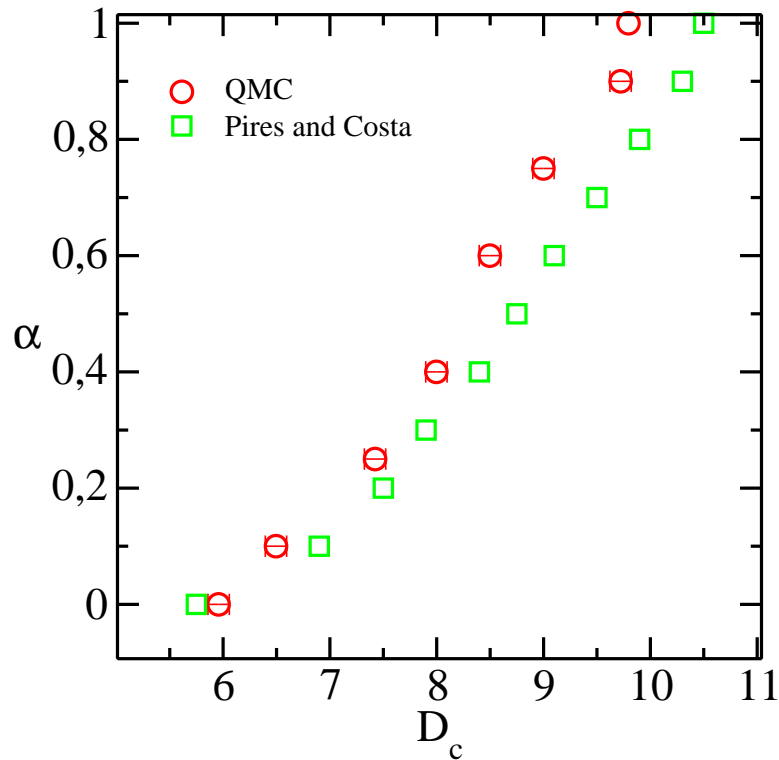


Figura 4.15: Comportamento da anisotropia em função do parâmetro  $\alpha = \frac{J_2}{J_1}$ . Os quadrados são os resultados de Pires e Costa[1] pelo método de operadores de ligação e os círculos são os resultados desse trabalho de acordo com Eq. (4.8).

### 4.3.6 Anisotropia $D$ grande, comportamento do *gap*

Acima da anisotropia crítica,  $D > D_c$ , assumimos uma expansão de baixa temperatura para susceptibilidade magnética uniforme similar a desenvolvida por Troyer, et al [55] :

$$\chi(L, \beta) \approx \beta^{-n} \exp(-\beta \Delta(L, \beta)), \quad (4.21)$$

onde  $\Delta(L, \beta)$  é o *gap* para a rede de tamanho finito considerando as excitações térmicas[1],  $\beta$  é a temperatura inversa e a dependência com anisotropia  $D$  está implícita. O parâmetro  $n$  depende da forma da relação de dispersão[55]. A derivada do logaritmo da susceptibilidade  $\frac{-\partial \ln(\chi(L, \beta))}{\partial \beta}$  fornece uma maneira para estimar o parâmetro  $n$ . Em temperaturas baixas essa derivada é  $\Delta(L, \beta) + nT$ . A inclinação  $n$  é próxima de  $-1$  para tamanhos de rede pequenos (4,6) ( veja figura 4.16). Não foi possível estimar  $n$  para redes maiores devido ao grande esforço computacional necessário nesse regime de temperatura. Em uma abordagem bem simplificada podemos estimar o *gap* supondo o seguinte comportamento de tamanho finito:

$$\Delta(L, \beta) \approx \Delta(\infty, \beta) + AL^m. \quad (4.22)$$

Resolvendo a Eq. (4.21 para  $\Delta(L, \beta)$  obtemos

$$\ln(\chi(L) \beta^n) = -\beta \Delta(L, \beta), \quad (4.23)$$

$$n \ln(\chi(L) T) T = \Delta(L, \beta) \quad (4.24)$$

e substituindo Eq. (4.22) na última equação para  $n = -1$  obtém-se

$$\Delta(L, \beta) = -T \ln(T \chi(L)) = \Delta(\infty, \beta) + AL^{-m}. \quad (4.25)$$

Para baixas temperaturas podemos aproximar essa relação por

$$\Delta(L, T) \approx \Delta(\infty, 0) + \left. \frac{\partial \Delta(\infty, T)}{\partial T} \right|_{T=0} T + AL^{-m}. \quad (4.26)$$

Dessa forma, é possível realizar uma regressão linear ( $Y = A + BX$ ) no qual  $Y = \Delta(L, T) = -T \ln(T \chi(L))$ ,  $A = \Delta(\infty, 0) + AL^{-m} = \Delta(L, 0)$ , a inclinação é dada por  $B = \left. \frac{\partial \Delta(\infty, T)}{\partial T} \right|_{T=0}$  e  $X = T$ . Logo, a estimativa do *gap* de tamanho finito  $\Delta(L, 0)$  é dada pelo termo independente  $A$  da regressão linear da curva  $-T \ln(T \chi(L))$  por  $T$ .

Na Fig. 4.17 pode ser visto o gráfico de  $-T \ln(T \chi) \times \beta$  para diversos tamanhos de rede  $L$ . Na Fig. 4.17 é observado um gráfico de  $\Delta(L) \times T$  para diversas anisotropias. Ajustando uma curva aos dados de acordo com a Eq. (4.26), uma extrapolação de  $\Delta(\infty)$

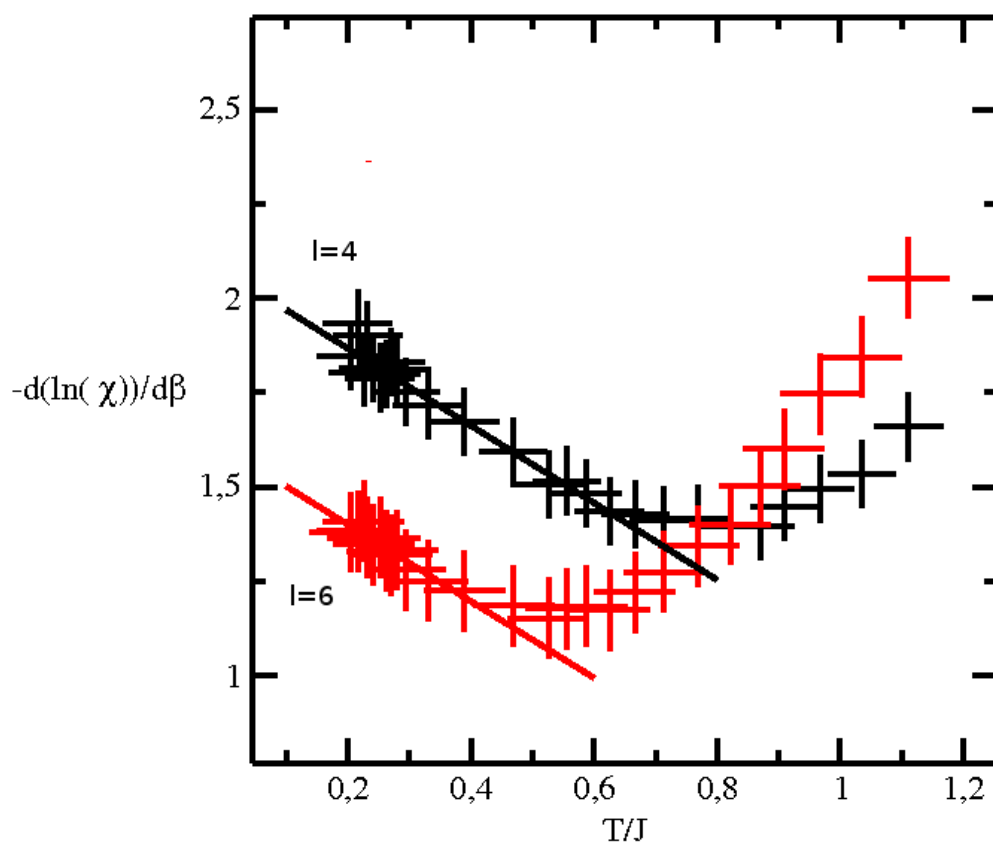


Figura 4.16: Cálculo do expoente  $n$  da Eq. (4.21) usando a derivada do logaritmo da susceptibilidade para rede de tamanho  $L = 4$  (círculos);  $n = -1.02 \pm 0.08$  e  $L = 6$  (quadrados)  $n = -1.0 \pm 0.1$  para anisotropia  $D = 10.1$ .

pode ser obtida. Na Fig. 4.19 pode ser visto um gráfico de  $\ln\Delta \times \ln(D - D_c)$  obtido por esta abordagem. A inclinação das curvas fornece uma estimativa para  $B = z\nu$ [7].

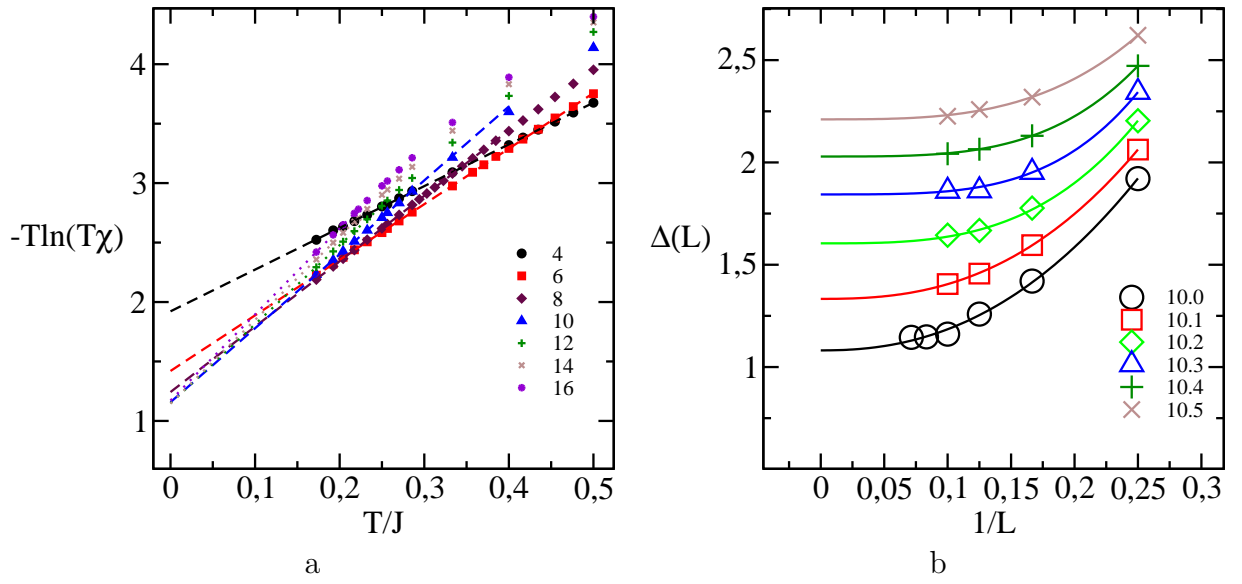


Figura 4.17: (a) Gap de tamanho finito obtido para vários tamanhos de rede pelo termo independente da regressão linear do gráfico  $T \ln(T\chi_\infty) \times T$  avaliado na anisotropia  $D = 10.0$ . (b)  $Gap$  no limite termodinâmico  $\Delta(\infty)$  extrapolado pelos  $gaps$  de tamanho finito  $\Delta(L)$  para  $D > D_c$  (legenda) de acordo com a Eq. (4.26).

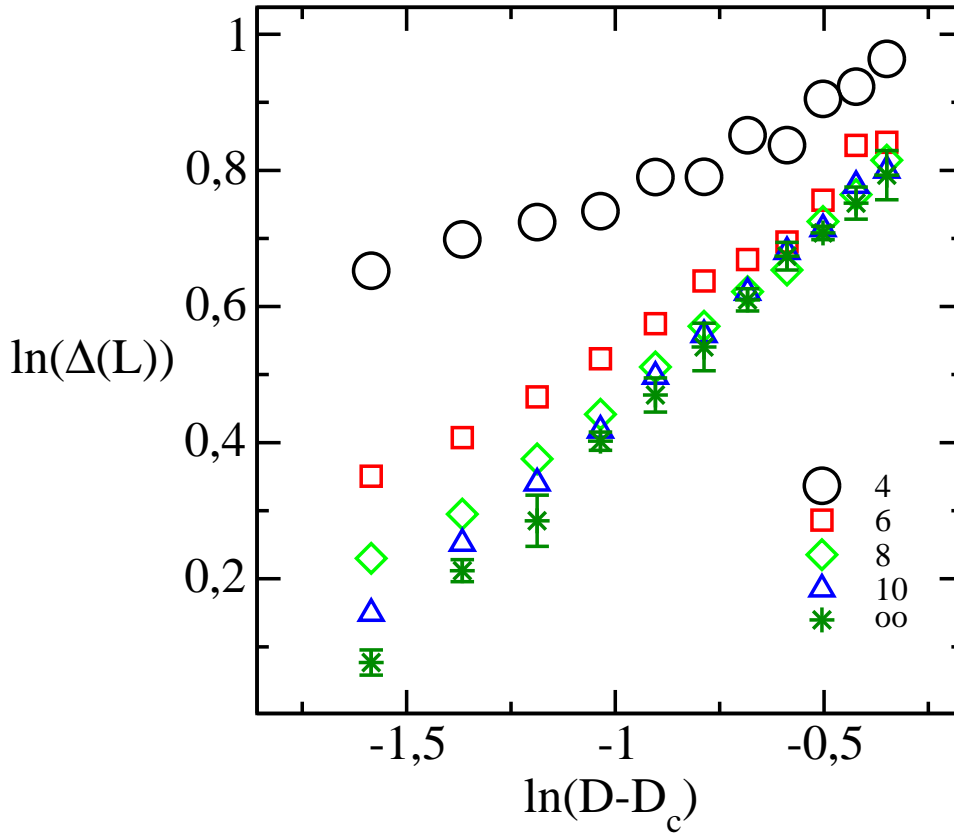


Figura 4.18: Gráfico logaritmo do gap de tamanho finito  $\ln(\Delta(L))$  em função do logaritmo da anisotropia relativa ( $\ln(D - D_c)$ ) para  $\alpha = 1.0$ . A inclinação da curva fornece  $z\nu$  em função do tamanho finito dado por  $z\nu = 0.24, 0.41, 0.48, 0.54$  para as respectivas redes simuladas 4, 6, 8, 10 (legenda). O gap extrapolado para rede de tamanho infinito ( $\infty$ )  $z\nu = 0.59$  é representado no gráfico pelo asterisco.

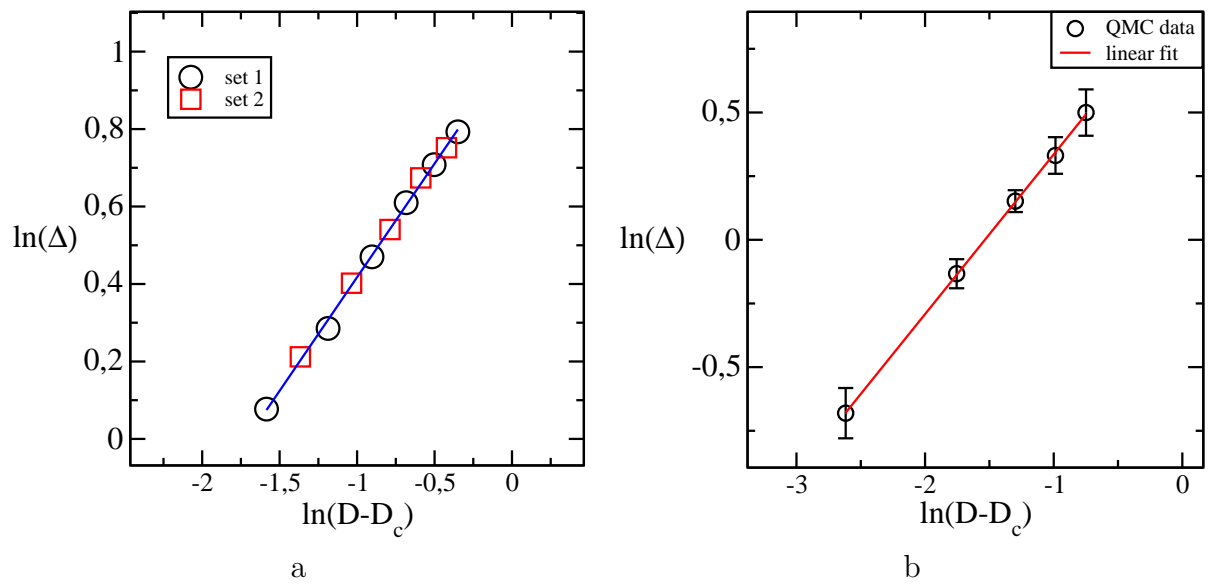


Figura 4.19: As figuras (a) e (b) ilustram um gráfico logarítmico do gap  $\ln(\Delta)$  em função do logarítmico da anisotropia relativa ( $\ln(D - D_c)$ ) para  $\alpha = 1.0$  e  $0.5$  respectivamente. (a) Duas estimativas de  $\nu$  dada pelas inclinações da regressão linear, uma dos círculos e outra dos quadrados, que foram usadas para estimar o valor médio e o erro  $z\nu = 0.59(1)$  para  $\alpha = 1.0$  e  $D_c = 9.795$ . (b) O valor e incerteza para  $\alpha = 0.5$  com  $D_c = 8.03$  é dado pelo resultado da inclinação da regressão linear na qual  $z\nu = 0.62(3)$ .

## 4.4 Diagrama de fase para Spin $S = \frac{3}{2}$ e 2

Ao aumentarmos o valor do spin, esperamos que o comportamento crítico para valores de spin inteiros seja próximo do resultado para  $S = 1$  na região próxima da anisotropia crítica  $D_c$  e ocorra apenas uma mudança de escala na energia do modelo devido ao spin  $S$ . De forma similar, esperamos que o resultado para valores de spin semi-inteiros seja dado pelo comportamento de  $S = \frac{1}{2}$  ou spins semi-inteiros maiores como  $S = \frac{3}{2}$  não mudem a ordem do estado fundamental do sistema. Para compararmos os resultados de  $S = 1, S = 2$  e  $S = \frac{3}{2}$  em uma mesma escala, dividimos o Hamiltoniano por  $S(S+1)$  o que implica uma redução na escala de temperatura e no parâmetro de anisotropia. A comparação dos diagramas de fase obtidos pode ser vista na figura 4.20.

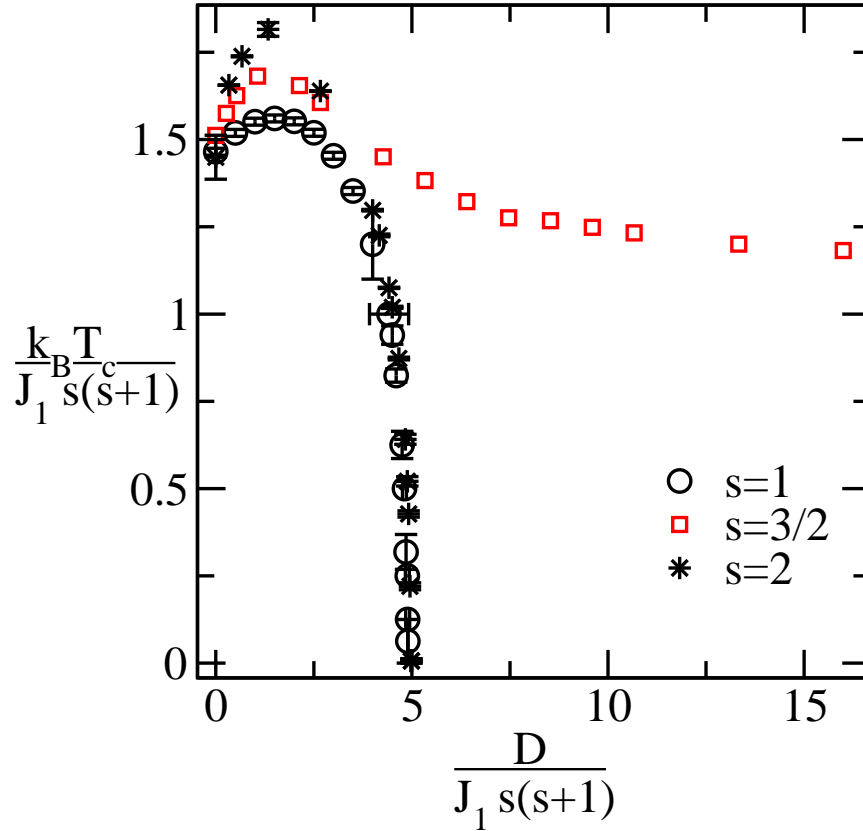
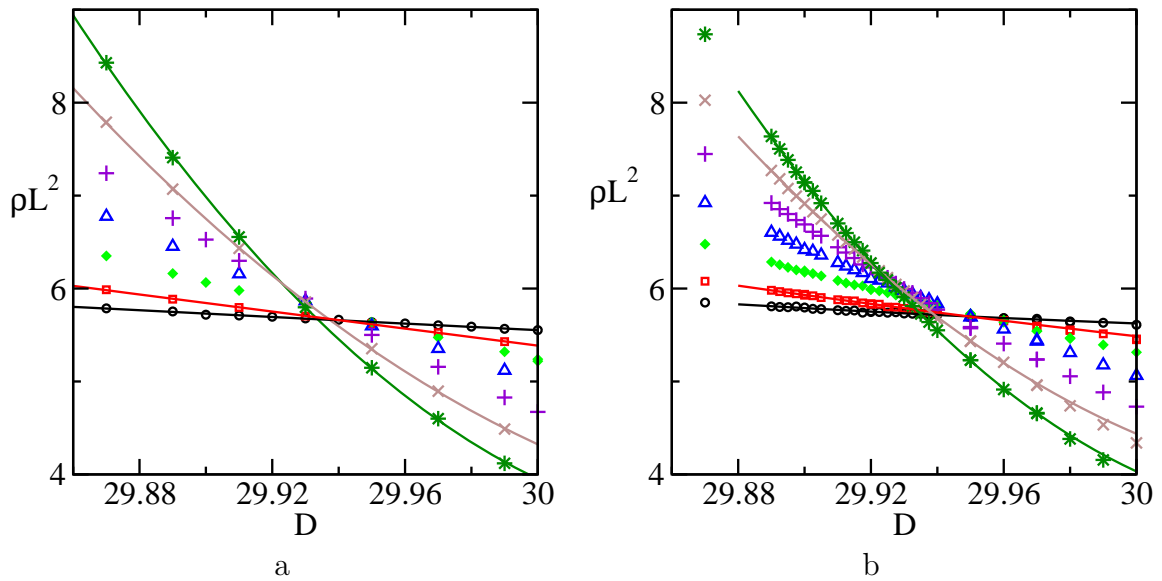


Figura 4.20: Diagrama de fase para spin  $S = 1$  (círculos),  $S = \frac{3}{2}$  (quadrados) e  $S = 2$  (asteriscos). Na figura pode ser observada a anisotropia crítica  $\frac{D_C}{S(S+1)J} = 4.8975(5)$  para  $S = 1$ ,  $\frac{D_C}{S(S+1)J} = 4.9868(7)$  para  $S = 2$ . Não foi observado transição de fase quântica para  $S = \frac{3}{2}$  ao variar a anisotropia  $D$ .

Os resultados para  $S = \frac{3}{2}e2$  foram obtidos de forma similar ao realizado para  $S = 1$ . A primeira estimativa de  $D_C$  e o colapso das curvas foi realizado de acordo com a Eq. (4.8) e pode ser visto nas Figs. 4.21 e 4.22.

O valor de  $\nu$  calculado depende consideravelmente do valor de  $D_c$  utilizado. Nem





[ Estimativa de  $D_c$  obtida pelo cruzamento das curvas de rigidez de spin das maiores redes (14,16) para  $S = 2$ . a)  $D_C = 29.9229(31)$  para  $TL = 2$  b)  $D_C = 29.9227(33)$  para  $TL = 4$ . ]

Figura 4.21: Estimativa de  $D_c$  obtida pelo cruzamento das curvas de rigidez de spin das maiores redes (14,16) para  $S = 2$ . O erro é dado pela diferença entre os valores obtidos do cruzamento das maiores (16,14) e menores (4,6) redes. Na Eq. (4.8) novamente assumimos  $z = 1$ ,  $R = TL$  obtendo a)  $D_C = 29.9229(31)$  para  $TL = 2$  b)  $D_C = 29.9227(33)$  para  $TL = 4$ .

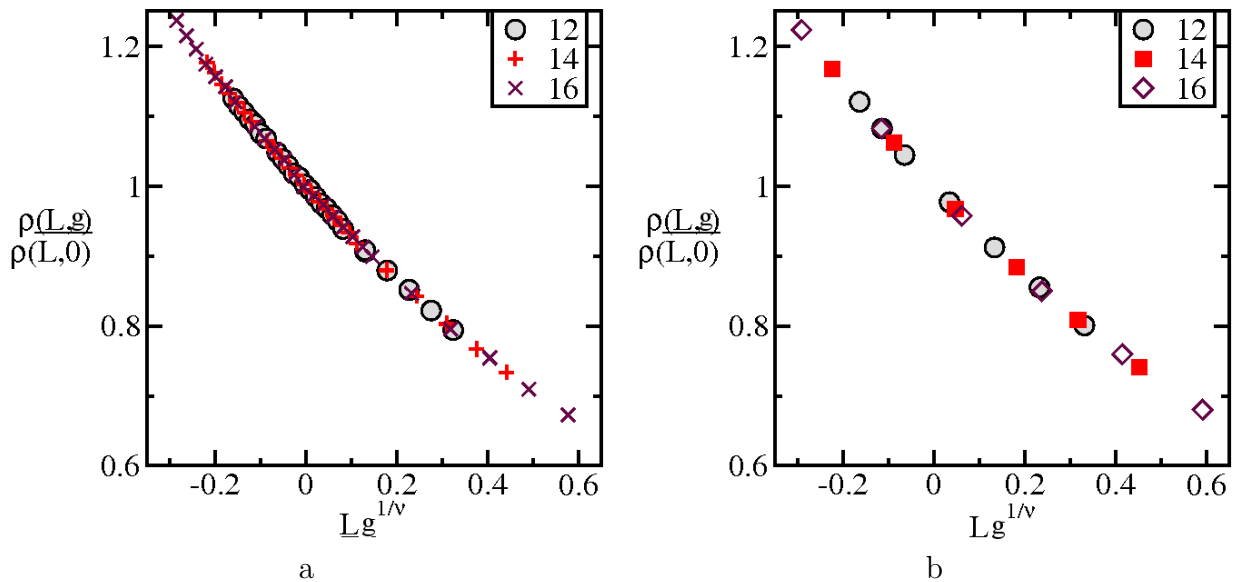


Figura 4.22: Colapso das curvas de rigidez de spin para  $D_C = 29.923$  conforme Eq. (4.8) para (a)  $z\nu = 0.497$ ,  $TL = 2$  e (b)  $z\nu = 0.499$ ,  $TL = 4$ .

sempre o valor correto de  $D_c$  produz o menor valor do erro de  $\nu$  quando este é calculado conforme a Eq. (4.20). Um critério mais apropriado pode ser obtido observando a influên-

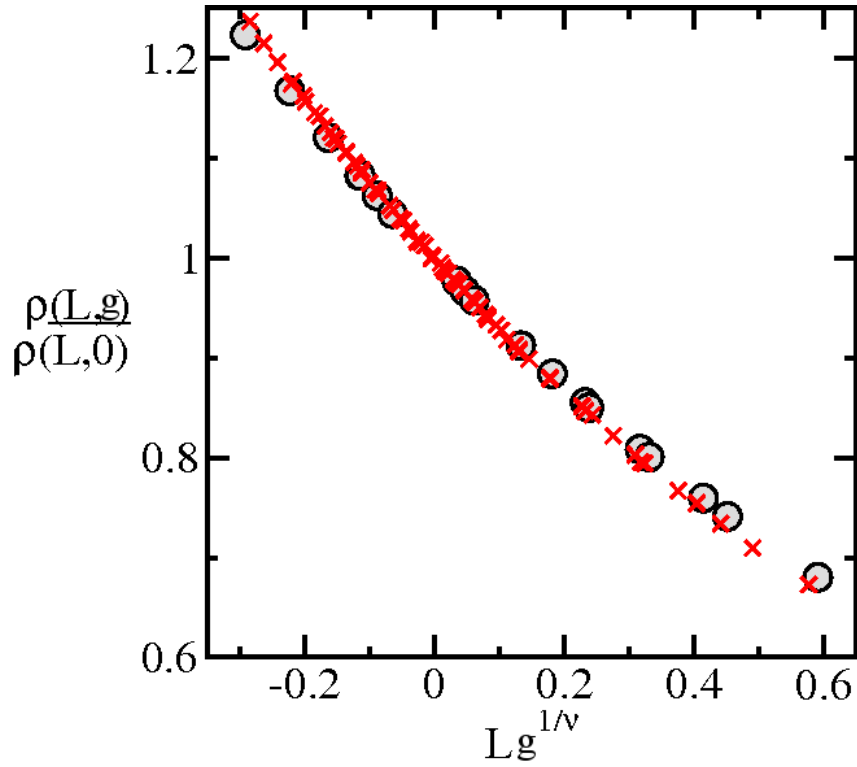


Figura 4.23: Superposição das duas curvas da Fig. 4.22 representadas por círculos e cruzeiros para respectivas razões de aspecto  $TL = 2$  e  $TL = 4$ .

cia de um valor incorreto  $D_c$  no cálculo de  $\nu$ . Seja o valor incorreto  $D'_c = D_c(1 + \epsilon)$ , no qual  $\epsilon$  é a diferença relativa do valor correto, temos que  $g' = 1 - \frac{D}{D'_c} \approx g + \frac{D}{D_c}\epsilon =$ . Sendo assim, podemos reescrever a Eq. (4.19) como:

$$\nu(L, L', \epsilon) = \frac{\ln(L) - \ln(L')}{\ln(L^2 \rho'(L, \epsilon) N(L')) - \ln(L'^2 \rho'(L', \epsilon))}, \quad (4.27)$$

expandindo esta em torno de  $\epsilon = 0$  obtemos

$$\nu(L, L', \epsilon) = \nu(L, L') + f_1(L, L')\epsilon + f_2(L, L')\epsilon^2 + O(\epsilon^3). \quad (4.28)$$

A estimativa de  $\nu$  é obtida pela média das estimativas  $\nu(\epsilon, L, L')$  utilizando diferentes pares  $L, L'$ . Se realizarmos médias utilizando pares  $\epsilon, -\epsilon$ , o termo linear pode ser eliminado restando apenas os termos  $\langle \nu(L, L') \rangle_{L, L'} + 2\langle f_2(L, L') \rangle_{L, L'}\epsilon^2$ . No limite  $\epsilon \rightarrow 0$  temos:

$$\langle \nu(\epsilon, L, L') \rangle_{L, L', \epsilon \rightarrow 0} = \langle \nu(L, L') \rangle_{L, L'}. \quad (4.29)$$

Assim temos a melhor estimativa de  $\nu$  para o valor de  $D_c$  que produz o menor desvio de  $\langle \nu(\epsilon, L, L') \rangle_{L, L', \epsilon}$ . O resultado para  $L \in [12, 16]$  pode ser visto na Fig. 4.24, na qual os círculos e quadrados são resultados obtidos utilizando um conjunto de dados nos quais

TL	$D_c$	$\nu$
2	29.923(4)	0.497(3)
4	29.924(5)	0.499(2)
2 e 4	29.923(5)	0.498(2)

Tabela 4.3: Estimativa para anisotropia crítica  $D_c$  e expoente crítico  $\nu$  para  $\alpha = 1$  e  $S = \frac{3}{2}$  e para razões de aspecto  $TL = 2$  e  $TL = 4$ . A terceira linha foi produzida utilizando os dados de ambas razões de aspecto.

$TL = 4$  e  $TL = 2$ , respectivamente. Os símbolos listrados são subconjuntos disjuntos dos dados representados pelos símbolos sólidos. O melhor valor de  $D_c$  pode ser observado na legenda da figura para cada conjunto de dados. O desvio da média em  $\langle L, L' \rangle$  é muito menor que aquele devido a  $\langle \epsilon \rangle$ . O resultado para estimativas de  $\nu$  e  $D_c$  foi obtido pelo método descrito acima e tem precisão de até 1 ordem de grandeza acima do que foi obtido apenas pelos métodos utilizados para  $S = 1$ . O valor médio de  $D_c$  e  $\nu$  pode ser visto na tabela abaixo:

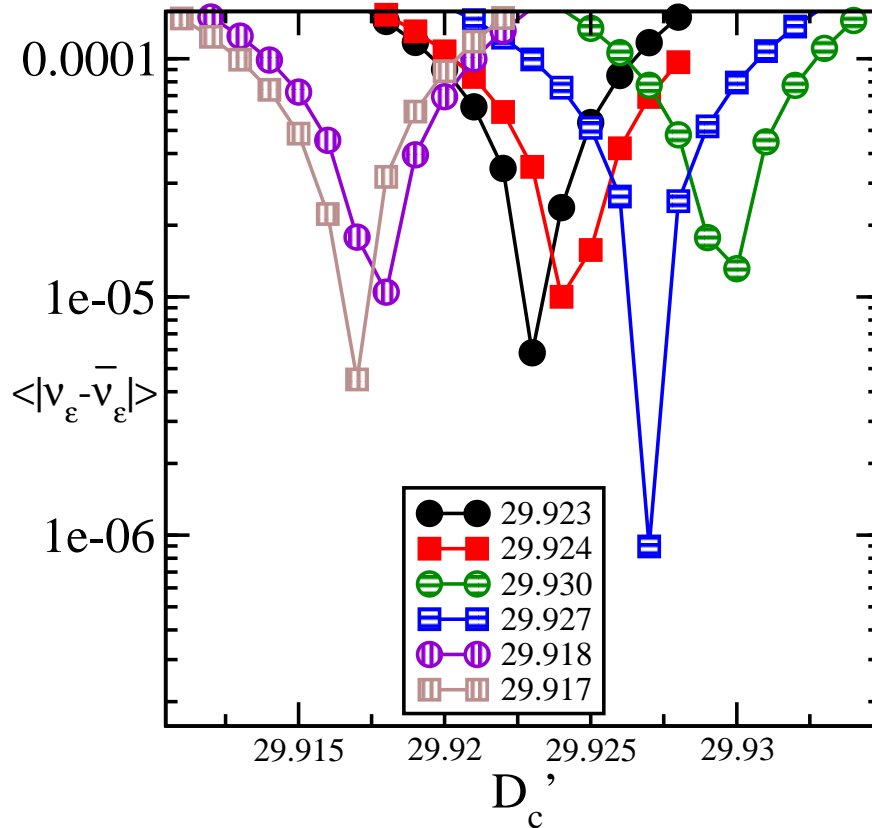


Figura 4.24: Determinação de  $D_c$  pelo menor desvio de  $\langle \nu(\epsilon, L, L') \rangle_{L, L', \epsilon}$  conforme Eq. (4.29). Os círculos e quadrados são resultados obtidos utilizando um conjunto de dados para  $TL = 4$  e  $TL = 2$ , respectivamente. O desvio está em escala logarítmica. Os símbolos listrados são subconjuntos disjuntos dos dados que deram origem aos símbolos sólidos.

Ao incluir redes de tamanhos menores, outras correções de escala passam a ser importantes como o deslocamento do argumento da função de escala  $F(gL^{\frac{1}{\nu}} + dL^{-\phi})$ . Desta forma, o desvio da média em  $\langle L, L' \rangle$  se torna significativo e da mesma proporção que o desvio ao tomar a média em  $\langle \epsilon \rangle$ . O colapso das curvas para  $L \in [8, 16]$  pode ser visto na figura 4.25.

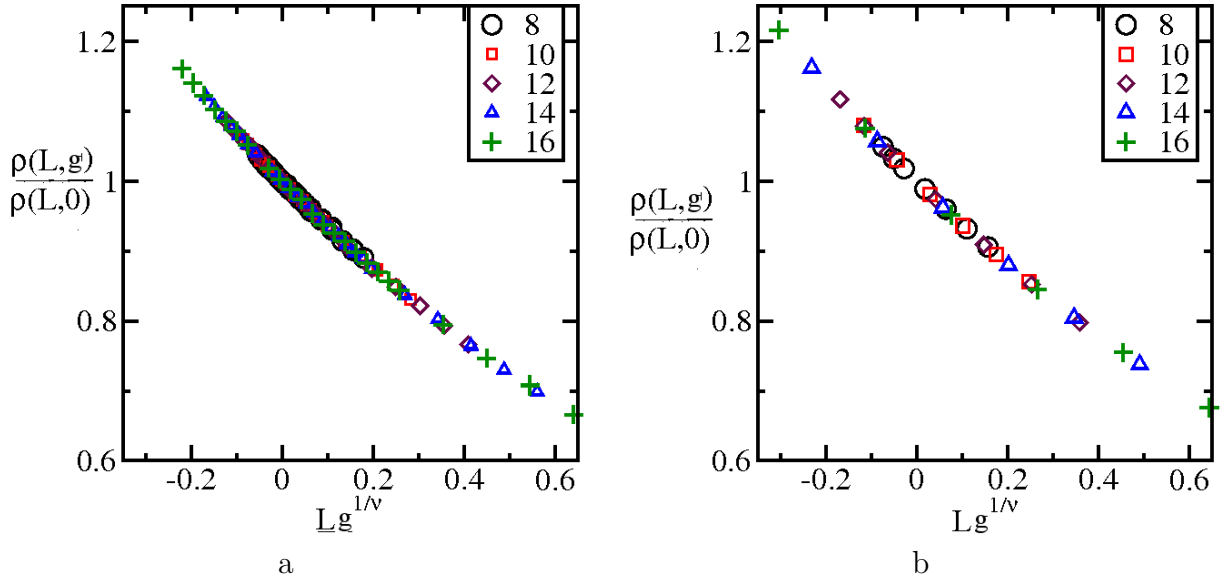


Figura 4.25: Colapso das curvas de rigidez de spin para redes de tamanho  $L \in [8, 16]$ . Melhor ajuste com (a)  $D_c = 29.914(8)$ ,  $z\nu = 0.4901(50)(88)$  para  $TL = 4$  e (b)  $D_c = 29.919(3)$ ,  $z\nu = 0.4907(70)(94)$  para  $TL = 2$ . O primeiro erro se deve ao desvio em  $\langle \epsilon \rangle$ , enquanto o segundo se deve ao desvio em  $\langle L, L' \rangle$ .

Podemos ver que os resultados para  $TL$  diferentes são próximos, portanto nossa estimativa final é dada levando em conta os valores de ambos conjuntos de dados:  $D_c = 29.923(5)$  e  $\nu = 0.498(2)$  para  $L \in [12, 16]$ . O valor  $\nu = 0.498(2)$  é condizente com o valor esperado de campo médio  $z\nu = 0.5$ . Como  $d + z = 4$  é a dimensão superior crítica do sistema, é esperado que o sistema assumira o valor de campo médio.

Repetindo o procedimento (como realizando para  $S = 1$ ) para estimativa do *gap* através da suscetibilidade, encontramos o valor de  $z\nu = 0.628(2)$ , no qual o erro foi estimado pela diferença da estimativa de dois conjuntos diferentes de dados. Este valor é próximo da estimativa obtida para  $S = 1$ , mas difere da estimativa de  $\nu$  por cálculo direto, Eq. (4.29). No processo de obtenção e extrapolação do *gap* foram feitas várias suposições que devem ter alterado o valor estimado. A suposição de que o comportamento do *gap* para redes pequenas permaneça a mesma ( $n = -1$ ) é a mais provável de estar equivocada, entretanto, não há como estabelecer essa relação para redes grandes utilizando os dados da susceptibilidade. O resultado encontrado para  $S = 2$  pode ser visto na figura 4.26.

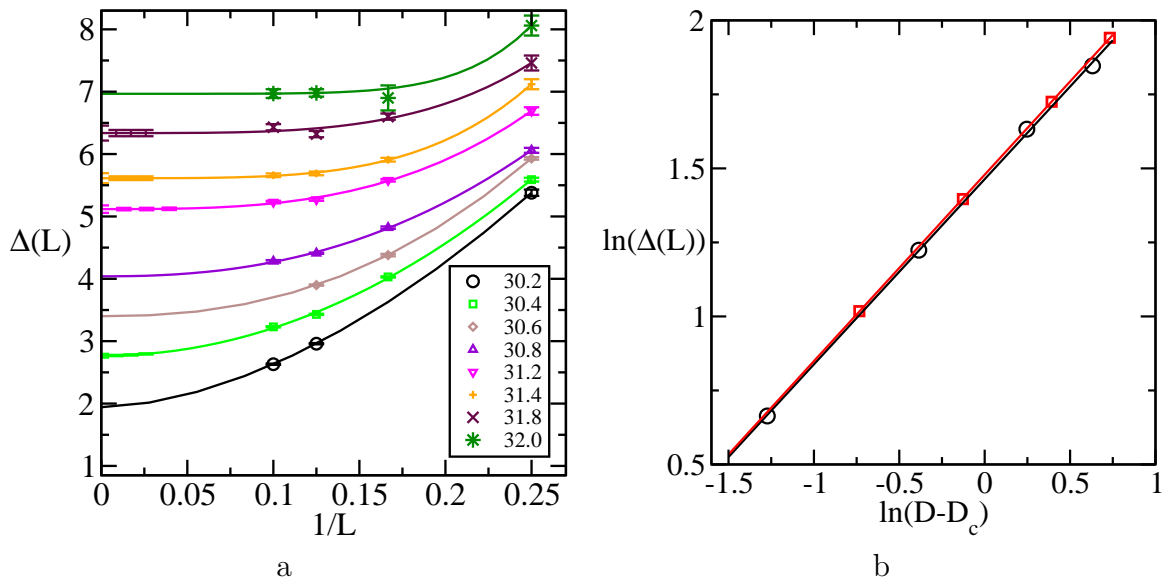


Figura 4.26: Em (a) pode ser observado o *gap* no limite termodinâmico extrapolado pelos *gaps* de tamanho finito para  $D > D_c$  obtido conforme Eq. (4.26). (b) ilustra um gráfico log-log do *gap* extrapolado ( $L \rightarrow \infty$ ) em função da anisotropia relativa ( $g = D - D_c$ ) para  $\alpha = 1.0$ . Dois conjuntos diferentes de anisotropias (círculos e quadrados) foram usados para estimar o erro de  $z\nu$ . A inclinação das curvas fornece  $z\nu = 0.628(2)$  com  $D_c = 29.92$ .

## 5 Conclusão

No presente trabalho estudamos a transição de fase quântica do modelo XY tridimensional com anisotropia de plano fácil  $D$ . Através de simulações de Monte Carlo Quântico (MCQ) obtivemos o diagrama de fase e expoente crítico  $z\nu$  e anisotropia crítica  $D_c$  para spin  $S = 1$  e  $2$ . Não foi observado transição de fase para  $S = 3/2$ . O diagrama de fase encontrado nesse trabalho para  $S = 1$  é qualitativamente idêntico ao obtido por Pires e Costa [1] com o método SCHA, principalmente próximo do ponto crítico  $D_c$ . Esse resultado é inesperado pois o método SCHA era mais adequado para a região de  $D$  pequeno[1]. O resultado obtido por Wang e Wang [4] pelo método operador de ligação que deveria ser mais adequado na região  $D$  grande não fornece bons resultados quando comparado ao nosso (MCQ). Uma possível explicação é que o método SCHA funciona bem para baixas temperaturas e as renormalizações das interações harmônicas consideradas por Pires e Costa [1] levaram em consideração as flutuações térmicas e quânticas. Enquanto que o método operador de ligação basea-se no valor de campo médio para um operador de bóson e para um valor global do potencial químico. Para obter o expoente crítico  $\nu$ , propusemos uma escala de tamanho finito que parece funcionar bem no caso estudado. O valor obtido nesse trabalho para  $z\nu$  está de acordo com o valor encontrado por Pires e Costa [1] e Wang e Wang [4]. Entretanto, o valor de  $D_c$  obtido difere significativamente, Wang e Wang[4] e Wang e Wong[5]. O único trabalho analítico encontrado na literatura que produz resultados de  $D_c$  próximos ao desta tese é o de Pires e Costa (SCHA)[1], o que não era esperado. Baseando apenas nos métodos analíticos da literatura não era possível fornecer um valor preciso de  $D_c$  com confiança. O valor de  $D_c$  foi obtido nessa tese por um método numérico e preciso, esclarecendo a incerteza entre os valores diferentes obtidos na literatura. O diagrama de fase para spins inteiros são similares, entretanto há um crescimento pronunciado para maior temperatura de transição com o aumento do spin  $S$ . O valor de  $\frac{D_c}{S(S+1)}$  são próximos perto do ponto de transição de fase quântica para diferentes valores de spin  $S$ . Como resultado desse trabalho foi produzido o artigo da Ref. [13].

## 5.1 Perspectivas

Uma das dificuldades encontradas nesse trabalho poderiam ter sido amenizadas caso houvesse um modo direto de mensurar observáveis não-diagonais como a magnetização transversal  $M_x$  o que forneceria mais confiança aos valores calculados. Esse modo não é disponível na implementação existente do programa disponibilizado *dirloop* do ALPS[36]. Em trabalhos futuros pretendemos implementar a avaliação de observáveis não-diagonais e aplicar ao estudo desse e outros modelos de spin. Uma extensão desse estudo sem necessidade de implementações adicionais pode ser realizada adicionando o termo de troca  $\gamma \sum S_i^z S_j^z$  no Hamiltoniano do sistema e obter o diagrama de fase para  $(\gamma, D)$ . Pode-se encontrar na literatura trabalhos analíticos para diferentes valores de  $\gamma$  e  $D$  tais como em [56], entretanto, acredito que não há resultados numéricos suficientes para comparação.

# *APÊNDICE A – Mapeamento Ising campo transverso para Ising clássico bidimensional*

Nesse apêndice mostramos como é possível mapear um sistema quântico de dimensão  $d$  em um sistema clássico equivalente de dimensão  $d + 1$ . Utilizaremos a decomposição de Suzuki-Trotter para fazer esse mapeamento, porém outros esquemas podem ser usados [24].

O sistema a ser mapeado é o sistema de Ising com campo transverso cujo Hamiltoniano é dado por:

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - h \sum_{i=1}^N \sigma_i^x. \quad (\text{A.2})$$

onde  $\sigma_i^\alpha, \alpha = x, y, z$  denotam as matrizes de spin de Pauli no sítio  $i$ . Aqui usamos condições periódicas de contorno.

Primeiro decomposmos o hamiltoniano em duas partes  $H_1$  e  $H_2$ , o modo da decomposição é importante pois determina a forma das interações no sistema clássico mapeado:

$$H = H_1 + H_2 \quad (\text{A.3})$$

$$H_1 = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \quad (\text{A.4})$$

$$H_1^i = -J \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \quad (\text{A.5})$$

$$H_2 = -h \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \quad (\text{A.6})$$

$$H_2^i = -h \sigma_i^x. \quad (\text{A.7})$$



Aplicando a fórmula de Suzuki-Trotter[27, 26]:

$$\exp(\hat{A} + \hat{B}) = [\exp(\hat{A}/m)\exp(\hat{B}/m)]^m + O\left(\frac{1}{m}\right) \quad (\text{A.8})$$

na função de partição  $Z$ , obtemos

$$Z_m^N = \text{Tr}[\exp(-\beta\frac{H_1}{m})\exp(-\beta\frac{H_2}{m})]^m, \quad (\text{A.9})$$

onde  $m$  é conhecida como a dimensão de Trotter.

Inserindo as relações de completas  $\sum_{\alpha_k} |\alpha_k\rangle\langle\alpha_k|$  após cada exponencial de  $(H_1)$  obtemos:

$$\begin{aligned} Z_m^N &= \sum_{\alpha_0} \langle\alpha_0| \left( \prod_{k=1}^m \exp(-\beta\frac{H_1}{m}) \left( \sum_{\alpha_k} |\alpha_k\rangle\langle\alpha_k| \right) \exp(-\beta\frac{H_2}{m}) \right) |\alpha_0\rangle, \quad (\text{A.10}) \\ &= \sum_{\{\alpha_k\}} \langle\alpha_0| \left( \prod_{k=1}^m \prod_{i=1}^N \exp(-\beta\frac{H_1^i}{m}) |\alpha_k\rangle\langle\alpha_k| \exp(-\beta\frac{H_2^i}{m}) \right) |\alpha_0\rangle \end{aligned}$$

onde a soma em  $|\alpha_0\rangle$  vem do traço.

Para continuar precisamos avaliar a ação de  $\exp(-\beta\frac{H_1^i}{m})$  no estado  $|\alpha_k\rangle$ :

$$\exp(-\beta\frac{H_1^i}{m})|\alpha_k\rangle = \exp\left(\frac{\beta J}{m} S_{i,k} S_{i+1,k}\right)|\alpha_k\rangle.$$

Inserindo esse resultado na equação anterior obtemos:

$$Z_m^N = \sum_{\{S_{i,k}\}} \langle\alpha_0| \left( \prod_{k=1}^m \prod_{i=1}^N \exp\left(\frac{\beta J}{m} S_{i,k} S_{i+1,k}\right) \langle\alpha_k| \exp\left(\frac{\beta h \sigma_i^x}{m}\right) |\alpha_{k+1}\rangle \right) |\alpha_0\rangle. \quad (\text{A.11})$$

Observando que

$$\exp(a\sigma_i^x) = \cosh(a) * \hat{I} + \sinh(a) * \sigma_i^x, \quad (\text{A.12})$$

$$a = \frac{\beta h}{m}. \quad (\text{A.13})$$

Podemos avaliar os elementos da matrix com  $|\alpha_k\rangle = \frac{1}{2}|1 + \sigma(k), 1 - \sigma(k)\rangle$ ,  $\sigma(k) = \pm 1$ .

$$\langle \alpha_k | \exp(a\sigma_i^x) | \alpha_{k+1} \rangle = \langle \alpha_k | \begin{pmatrix} \cosh(a) & \sinh(a) \\ \sinh(a) & \cosh(a) \end{pmatrix} | \alpha_{k+1} \rangle \quad (\text{A.14})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{4}(((1 + \sigma_k)(1 + \sigma_{k+1}) + (1 - \sigma_{k+1})(1 - \sigma_k))\cosh(a) \\ &+ ((1 + \sigma_k)(1 - \sigma_{k+1}) + (1 - \sigma_k)(1 + \sigma_{k+1}))\sinh(a)) \\ &= \frac{1}{2}((1 + \sigma_k\sigma_{k+1})\cosh(a) + (1 - \sigma_k\sigma_{k+1})\sinh(a)). \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Colocando essa expressão em uma forma de exponencial para que seja possível mapear os elementos da matrix com valores clássicos de spins:

$$\langle \alpha_k | \exp(a\sigma_i^x) | \alpha_{k+1} \rangle = \langle \alpha_k | C \exp(\beta W S_{i,k} S_{i,k+1}) | \alpha_{k+1} \rangle. \quad (\text{A.16})$$

Para  $S_{i,k}, S_{i,k+1}$  paralelos:

$$C \exp(\beta W) = \cosh(a). \quad (\text{A.17})$$

Para  $S_{i,k}, S_{i,k+1}$  anti-paralelos:

$$C \exp(-\beta W) = \sinh(a). \quad (\text{A.18})$$

Logo o valor de  $C$  é dado por:

$$C = \sqrt{\sinh(a)\cosh(a)} \equiv \sqrt{\frac{1}{2}\sinh(2a)}, \quad (\text{A.19})$$

substituindo o valor de  $C$  em A.17 e isolando  $W$

$$\exp(\beta W) = \frac{\cosh(a)}{\sqrt{\sinh(a)\cosh(a)}}, \quad (\text{A.20})$$

$$W = \frac{m}{2\beta} * \ln\left(\frac{\cosh(a)}{\sinh(a)}\right) \equiv \frac{m}{2\beta} \ln(\coth(a)). \quad (\text{A.21})$$

Finalmente substituindo esse resultado na Eq A.11:

$$Z_m^N = \sum_{\{S_{i,k}\}} \langle \alpha_0 | \left( \prod_{k=1}^m \prod_{i=1}^N \exp\left(\frac{\beta J}{m} S_{i,k} S_{i+1,k}\right) C \exp\left(\frac{\beta W}{m} S_{i,k} S_{i,k+1}\right) \right) | \alpha_0 \rangle \quad (\text{A.22})$$

$$= C^{MN} \sum_{\alpha_0} \langle \alpha_0 | \exp\left(-\beta \sum_{i,k=1}^{N,m} \left( \frac{-J}{m} S_{i,k} S_{i+1,k} + \frac{-W}{m} S_{i,k} S_{i,k+1} \right)\right) | \alpha_0 \rangle, \quad (\text{A.23})$$

que é a função de partição do sistema clássico de Ising 2D, isto é,

$$\begin{aligned}
 &= \text{Tr}(\exp(-\beta H_{ising})) \\
 H_{ising} &= \sum_{i,k}^{N,M} \frac{-J}{m} S_{i,k} S_{i+1,k} + \frac{-W}{m} S_{i,k} S_{i,k+1} + \frac{-\ln(C)}{\beta}.
 \end{aligned} \tag{A.24}$$

Agora podemos calcular  $Z_m$  [57, 58]:

$$\begin{aligned}
 Z_m^N &= 2^{N-1} \left( \prod_{i=1}^N \cosh\left(\frac{m\gamma_{2l}}{2}\right) \prod_{i=1}^N \sinh\left(\frac{m\gamma_{2l}}{2}\right) \right. \\
 &\quad \left. + \prod_{i=1}^N \cosh\left(\frac{m\gamma_{2l+1}}{2}\right) + \prod_{i=1}^N \sinh\left(\frac{m\gamma_{2l+1}}{2}\right) \right),
 \end{aligned} \tag{A.25}$$

onde  $\gamma_l$  é dado por:

$$\cosh\gamma_l = \cosh(2ah)\cosh(2aJ)\sinh(2ah)\sinh(2aJ)\cos\frac{\pi l}{m}. \tag{A.26}$$

Em primera ordem em  $\frac{1}{m}$ :

$$\begin{aligned}
 \gamma_l &= \beta \frac{\epsilon(l)}{m} + O(m^{-2}); \quad \epsilon(l) = 2 \left( h^2 + J^2 - 2hJ \cos\left(\frac{\pi l}{N}\right) \right)^{\frac{1}{2}} \\
 Z^N &= \lim_{m \rightarrow \infty} Z_m^N,
 \end{aligned} \tag{A.27}$$

$$\begin{aligned}
 z^N &= 2^{N-1} \left( \prod_{i=1}^N \cosh(\epsilon_{2l}) + \prod_{i=1}^N \sinh(\epsilon_{2l}) \right. \\
 &\quad \left. + \prod_{i=1}^N \cosh(\epsilon_{2l+1}) + \prod_{i=1}^N \sinh(\epsilon_{2l+1}) \right)
 \end{aligned} \tag{A.28}$$

$$\begin{aligned}
 -\beta \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F}{N} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln(Z^N)}{N} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left( 2 \cosh\left(\beta \epsilon\left(\frac{qN}{\pi}\right)\right) \right) dq
 \end{aligned} \tag{A.29}$$

Pode-se verificar que a Eq A.29 é precisamente o resultado para o modelo 1D em um campo transverso [59]. Vamos analisar a aproximação  $Z^N$  mais detalhadamente. Aqui nós tivemos que utilizar explicitamente a solução para o modelo finito. Para um sistema clássico genuíno e suficientemente grande, bastaria utilizar apenas o maior autovalor da matrix de transferência, mas isso não pode ser aplicado aqui. No caso do sistema clássico efetivo, as interações entre os spins dependem de uma forma complicada da dimensão de Trotter  $m$ . Tal dependência não aparece em modelos clássicos genuínos. Logo o

mapeamento deve ser feito com cautela, sem tomar o sistema como clássico de forma literal em todos aspectos. Entretanto existe um limite especial no qual a correspondência se torna exata, o caso quando  $T \rightarrow 0$ . Para isso devemos tomar o limite  $m \rightarrow \infty$  primeiro. Sem perda de generalidade podemos fazer  $T = \frac{\Gamma}{m}$  e usar Eq. A.23 para obter a energia por sítio do estado fundamental do modelo unidimensional em um campo transversal. Apesar de ter sido realizado o mapeamento para um sistema de dimensão  $d + 1$  em geral o comportamento perto da criticalidade é aquele de um sistema em  $d + z$  dimensões onde  $z$  é o expoente dinâmico crítico. Portanto  $z = 1$  é o caso particular.

## *APÊNDICE B – Correções de escala para susceptibilidade uniforme*

A relação de escala com correções para suscetibilidade é dada por:

$$\chi(L, g) = N'(L) \frac{1}{TL^d} F_\chi(cTL^z, gL^{\frac{1}{\nu}}). \quad (\text{B.1})$$

Seguindo procedimento similar ao realizado para rigidez de spin, substituímos  $T$  por  $L_\tau = RL^z$

$$\chi(L, g) = N'(L) \frac{R}{L^{d+z}} F_\chi(cTL^z, gL^{\frac{1}{\nu}}), \quad (\text{B.2})$$

$$\chi(L, g) = N(L) F_\chi(cTL^z, gL^{\frac{1}{\nu}}), \quad (\text{B.3})$$

onde  $N(L) = N'(L) \frac{R}{L^{d+z}}$ .

Expandimos a função de escala em torno de  $g = 0$  e obtemos:

$$\chi(L, g) = N(L)(F_\chi(0) + F'_\chi(0)gL^{\frac{1}{\nu}} + O(g^2)) \quad (\text{B.4})$$

$$= A(L) + B(L)g \quad (\text{B.5})$$

na qual

$$A(L) = N(L)F_\chi(0), \quad (\text{B.6})$$

$$B(L) = N(L)F'_\chi(0)L^{\frac{1}{\nu}}. \quad (\text{B.7})$$

Realizando um ajuste polinomial em um gráfico  $\chi \times g$  é possível obter o termo independente já que para  $g = 0$ , temos  $\chi(L, 0) = A(L)$ . A ordem do polinômio usado depende do intervalo de valores de  $D$  (usualmente linear, para um pequeno intervalo). A dependência

$N(L)$  pode ser então eliminada ao dividir  $\chi$  por  $A(L)$ , ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{\chi(L, g)}{A(L)} &= \frac{\chi(L, g)}{\chi(L, 0)}, \\ &\approx 1 + \frac{F'_\chi(0)}{F_\chi(0)} g L^{\frac{1}{\nu}} + O(g^2). \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Podemos ver que a inclinação de  $\frac{\chi(L, g)}{A(L)}$  é dada por:

$$\frac{B(L)}{A(L)} = \frac{F'_\chi(0)}{F_\chi(0)} L^{\frac{1}{\nu}}. \quad (\text{B.9})$$

Pode-se tomar o logarítmo para encontrar:

$$\ln\left(\frac{B(L)}{A(L)}\right) = \ln\left(\frac{F'_\chi(0)}{F_\chi(0)}\right) + \ln(L) \frac{1}{\nu}. \quad (\text{B.10})$$

Subtraindo a última equação para tamanhos de rede  $L, L'$  diferentes, obtém-se

$$\ln\left(\frac{B(L)}{A(L)}\right) - \ln\left(\frac{B(L')}{A(L')}\right) = \ln\left(\frac{L}{L'}\right) \frac{1}{\nu} \quad (\text{B.11})$$

$$\ln(B(L)A(L')) - \ln(B(L')A(L)) = \ln\left(\frac{L}{L'}\right) \frac{1}{\nu}. \quad (\text{B.12})$$

Isolando  $\nu$  obtemos:

$$\nu(L, L') = \frac{\ln(L) - \ln(L')}{\ln(B(L)A(L')) - \ln(B(L')A(L))}. \quad (\text{B.13})$$

As Eqs. B.8 e B.13 são utilizadas para obter estimativas e incertezas de  $\nu$  e  $D_c$  de forma análoga à descrita na seção 4.3.4 para rigidez de spin.

## *Referências Bibliográficas*

- [1] PIRES, A.; COSTA, B. Quantum phase transitions in the anisotropic three dimensional XY model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 388, n. 18, p. 3779 – 3784, 2009.
- [2] GOTTLÖB, M. H. A. P. Critical behaviour of the 3d xy-model: a monte carlo study. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 201, n. 4, p. 593 – 613, 1993. ISSN 0378-4371.
- [3] RUI, Z. Superfluid-mott-insulator phase transition of bosons in an optical lattice. *Communications in Theoretical Physics*, v. 47, n. 5, p. 897, 2007.
- [4] WANG, H.-T.; WANG, Y. Long-range order in gapped magnetic systems induced by bose-einstein condensation. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 71, p. 104429, Mar 2005.
- [5] WONG, W. H.; LO, C. F.; WANG, Y. L. Coupled-cluster approximation for a spin-1 heisenberg antiferromagnet with anisotropic exchange interaction and easy-plane single-ion anisotropy. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 50, p. 6126–6136, Sep 1994.
- [6] CONTINENTINO, M. A. *Quantum scaling in many-body systems*. [S.l.]: Singapore : River Edge, NJ : World Scientific, 2001.
- [7] SACHDEV, S.; KEIMER, B. Quantum criticality. *AIP*, v. 64, n. 2, p. 29–35, 2011. ISSN 00319228.
- [8] PIRES, A.; GOUVEA, M. Quantum phase transition in the two-dimensional xy model with single-ion anisotropy. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 388, n. 1, p. 21 – 27, 2009. ISSN 0378-4371.
- [9] PAN, K.-K. Series expansion study of spin-1 heisenberg antiferromagnet with easy-plane single-ion anisotropy. *Physics Letters A*, v. 374, n. 31-32, p. 3225 – 3229, 2010.
- [10] PADUAN-FILHO, A.; GRATENS, X.; OLIVEIRA, N. F. Field-induced magnetic ordering in  $niCl_24sc(nh_2)_2$ . *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 69, p. 020405, Jan 2004.
- [11] SANDVIK, A. W.; HAMER, C. J. Ground-state parameters, finite-size scaling, and low-temperature properties of the two-dimensional  $s = \frac{1}{2}$  xy model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 60, n. 9, p. 6588–6593, Sep 1999.
- [12] ROSCILDE, T.; HAAS, S. Mott glass in site-diluted  $s = 1$  antiferromagnets with single-ion anisotropy. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 99, p. 047205, Jul 2007.

- [13] GUIMARAES, M.; COSTA, B. V. et al. Phase diagram of the 3d quantum anisotropic XY model. *J. MAGN. MAGN. MATER.*, v. 332, n. 0, p. 103 – 108, 2013.
- [14] N, G. *Lectures on phase transition and the renormalization group*. [S.l.: s.n.], 1992.
- [15] BRAGA, M. R. *Estudo de filmes magnéticos ultrafinos pelo Método de Monte Carlo*. Dissertação (Mestrado), 2006.
- [16] P., E. *Prog. Amsterdam Acad.*, v. 36, p. 153, 1933.
- [17] FISHER, M. E. The renormalization group in the theory of critical behavior. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 46, p. 597–616, Oct 1974.
- [18] CALLEN, H. B. *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics*. [S.l.: s.n.], 1985. 263 p.
- [19] SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*. [S.l.: s.n.], 1997.
- [20] VOJTA, M. Quantum phase transitions. *Reports on Progress in Physics*, v. 66, n. 12, p. 2069, 2003.
- [21] KADANOFF, L. P. et al. Static phenomena near critical points: Theory and experiment. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 39, p. 395–431, Apr 1967.
- [22] WILSON, K. G. Renormalization group and critical phenomena. i. renormalization group and the kadanoff scaling picture. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 4, p. 3174–3183, Nov 1971.
- [23] WIDOM, B. Surface tension and molecular correlations near the critical point. *Journal of Chem. Phys.*, v. 43, p. 3892, 1965.
- [24] SACHDEV, S. *Quantum Phase Transitions*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1999.
- [25] MENG, Z. Y. *Quantum Monte Carlo Studies of Shastry-Sutherland Quantum Antiferromagnet*. Dissertação (Mestrado) — Insitut für Theoretische Physik III, Universität Stuttgart, 2009.
- [26] TROTTER, H. F. *Proc. Am. Math. Soc.* 10,545, v. 10, p. 545, 1959.
- [27] SUZUKI, M. *Prog. Theo. Phys.*, v. 56, p. 1454, 1976.
- [28] EVERTZ, H. G.; LANA, G.; MARCU, M. Cluster algorithm for vertex models. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 70, n. 7, p. 875–879, Feb 1993.
- [29] SANDVIK, A. W. A generalization of handscomb’s quantum monte carlo scheme-application to the 1d hubbard model. *Journal of Physics A*, v. 25, p. 3667–3682, Jul 1992.
- [30] CHEN, Y. C.; CHEN, H. H.; LEE, F. *Quantum Monte Carlo study of the spin-1/2 Heisenberg model*. [S.l.]: American Physical Society, May 1991. 11082–11087 p.
- [31] CHEN, K.; FERRENBERG, A. M.; LANDAU, D. P. Static critical behavior of three-dimensional classical heisenberg models: A high-resolution monte carlo study. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 48, p. 3249–3256, Aug 1993.



- [32] SOUZA, A. J. F. de; LYRA, M. L. Reweighting histograms in quantum monte carlo studies of the heisenberg model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 65, p. 100405, Mar 2002.
- [33] SANDVIK, A. W.; KURKIJÄRVI, J. Quantum monte carlo simulation method for spin systems. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 43, p. 5950–5961, Mar 1991.
- [34] SANDVIK, A. W. Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional heisenberg model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 56, n. 18, p. 11678–11690, Nov 1997.
- [35] SANDVIK, A. W. Stochastic series expansion method with operator-loop update. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 59, n. 22, p. R14157–R14160, Jun 1999.
- [36] ALBUQUERQUE, A. et al. The alps project release 1.3: Open-source software for strongly correlated systems. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, v. 310, n. 2, Part 2, p. 1187 – 1193, 2007. ISSN 0304-8853. Proceedings of the 17th International Conference on Magnetism, The International Conference on Magnetism.
- [37] SYLJUÅSEN, O. F.; SANDVIK, A. W. Quantum monte carlo with directed loops. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 66, n. 4, p. 046701, Oct 2002.
- [38] ALET, F.; WESSEL, S.; TROYER, M. Generalized directed loop method for quantum monte carlo simulations. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 71, n. 3, p. 036706, Mar 2005.
- [39] THIJSSEN, J. *Computational Physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2003.
- [40] POLLET, L. et al. Optimal monte carlo updating. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 70, n. 5, p. 056705, Nov 2004.
- [41] ALET, F.; WESSEL, S.; TROYER, M. Generalized directed loop method for quantum monte carlo simulations. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 71, p. 036706, Mar 2005.
- [42] METROPOLIS A. W. ROSENBLUTH, M. N. R. N.; TELLER, A. H. *Journal of Chem. Phys.*, v. 21, p. 1087, 1953.
- [43] SWENDSEN, R. H.; WANG, J.-S. Nonuniversal critical dynamics in monte carlo simulations. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 58, p. 86–88, Jan 1987.
- [44] WOLFF, U. Collective monte carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 62, p. 361–364, Jan 1989.
- [45] PESKUN, P. H. Optimum monte carlo sampling using markov chains. *Biometrika*, v. 60, p. 603, 1973.
- [46] FRIGESSI, C.-R. H. A.; YOUNES, L. Optimal spectral structure of reversible stochastic matrices, monte carlo methods and the simulation of markov random fields. *The Annals of Applied Probability*, v. 2, n. 3, p. 610–628, Ago 1992.
- [47] SCALAPINO, D. J.; WHITE, S. R.; ZHANG, S. Insulator, metal, or superconductor: The criteria. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 47, p. 7995–8007, Apr 1993.

- [48] POLLOCK, E. L.; CEPERLEY, D. M. Path-integral computation of superfluid densities. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 36, p. 8343–8352, Dec 1987.
- [49] FISHER, M. E.; BARBER, M. N.; JASNOW, D. Helicity modulus, superfluidity, and scaling in isotropic systems. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 8, p. 1111–1124, Aug 1973.
- [50] WALLIN, M. et al. Superconductor-insulator transition in two-dimensional dirty boson systems. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 49, p. 12115–12139, May 1994.
- [51] SONDHI, S. L. et al. Continuous quantum phase transitions. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 69, p. 315–333, Jan 1997.
- [52] SANDVIK, A. W. Computational studies of quantum spin systems. *AIP Conf. Proc.*, v. 135, p. 1297, 2010. ArXiv:1101.3281v1.
- [53] WANG, L.; BEACH, K. S. D.; SANDVIK, A. W. High-precision finite-size scaling analysis of the quantum-critical point of  $S=1/2$  Heisenberg antiferromagnetic bilayers. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 73, p. 014431, Jan 2006.
- [54] WANG, K. B. L.; SANDVIK, A. W. Data collapse in the critical region using finite-size scaling with subleading corrections. *arXiv*, 2005. Mat0505194v1.
- [55] TROYER, M.; TSUNETSUGU, H.; WURTZ, D. Thermodynamics and spin gap of the heisenberg ladder calculated by the look-ahead lanczos algorithm. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 50, n. 18, p. 13515–13527, Nov 1994.
- [56] ROMHÁNYI, J.; PENC, K. Multiboson spin-wave theory for  $Ba_2CoGe_2O_7$ : A spin- $\frac{3}{2}$  easy-plane néel antiferromagnet with strong single-ion anisotropy. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 86, p. 174428, Nov 2012.
- [57] ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 65, p. 117–149, Feb 1944.
- [58] KAUFMAN, B.; ONSAGER, L. Crystal statistics. iii. short-range order in a binary ising lattice. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 76, p. 1232–1252, Oct 1949.
- [59] LIEB, T. S. E.; MATTIS, D. *Ann. Phys.*, v. 16, p. 407, 1961.