

EFEITOS DE TAMANHO EM CADEIAS DE HEISENBERG-ISING
COM INTERAÇÕES ANTIFERROMAGNÉTICAS

DJALMA MEDEIROS

*Este exemplar corresponde
à redação final da Tese
defendida pelo aluno Djalma Medeiros
e aprovado pela
Banca Examinadora.*

Campinas, 15 de Maio, 1991

Guillermo Cabrera

Tese apresentada à
Universidade Estadual de Campinas,
como requisito parcial à obtenção
do Grau de DOUTOR EM CIÊNCIAS:
Menção Física.

Orientação:
Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún

Ao meu pai, Juvenal

À minha mãe, Rosa

À Lucélia,

com muito afeto.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Guillermo Cabrera, pela orientação segura e constante estímulo durante o desenvolvimento deste trabalho;

Aos companheiros de grupo: Denise, Gustavo, Machado, Domingos, Rodolfo;

A João Hermes, Airton e Paulo pela ajuda sobre muitos aspectos da computação;

Aos professores, colegas e funcionários do Instituto de Física;

A todos os amigos que com o calor humano, indiretamente muito contribuíram para a realização desta pesquisa;

Um agradecimento especial às minhas irmãs, Rosinha e Maria José, pela dedicação;

Ao CNPq, pela ajuda financeira.

RESUMO

Cadeias quânticas finitas do tipo Heisenberg-Ising, com spin $s = 1/2$ e condições de contorno periódicas, são resolvidas por técnicas numéricas de uma forma exata, diagonalizando o Hamiltoniano com o método de Lanczos até tamanhos $N = 28$ spins. Quantidades físicas interessantes, tais como a energia do estado fundamental, gap de massa, velocidade da onda de spin e funções de correlação são computadas. Leis de escala para as correções de tamanho são obtidas e comparadas com predicções analíticas sugeridas pelo *ansatz* de Bethe e pela invariância conforme. Os resultados da computação mostram que em toda a região anisotrópica o gap de massa fecha-se exponencialmente com o tamanho. O estado fundamental extrapolado é duplamente degenerado e apresenta ordem de longo alcance com componentes dominantes do tipo Néel. Flutuações quânticas tornam-se mais importantes à medida que a anisotropia é reduzida, levando a um estado fundamental singlete sem ordem de longo alcance para o sistema infinito no ponto isotrópico. Neste regime, os efeitos de tamanho têm correções logarítmicas. Uma mudança no comportamento da velocidade da onda de spin é predito para $N \sim 50$, bem acima dos tamanhos disponíveis em um típico cálculo de Lanczos. Tabelas e gráficos das quantidades computadas são apresentadas juntamente com valores extrapolados usando algoritmos padrões.

ABSTRACT

Finite Heisenberg-Ising quantum chains, for spin $s = 1/2$ and periodic boundary conditions, are exactly solved by numerical methods diagonalizing the Hamiltonian using the Lanczos method up to size $N = 28$ spins. Interesting physical quantities are computed, including the ground state energy, the mass gap, the spin-wave velocity, and correlation functions. Scaling laws with size are obtained and compared with analytical predictions suggested by Bethe *ansatz* and conformal invariance. Computational results show that the mass gap closes exponentially with size in the whole anisotropic region. The extrapolated ground state is double degenerate, and displays long-range order with dominant components of the Néel type. Quantum fluctuations are enhanced as the anisotropy is reduced, leading to a singlet ground state without long-range order for the infinite system at the isotropic point. In this regime, size effects have logarithmic corrections. A crossover is predicted in the spin-wave velocity behavior at $N \sim 50$, well above the available sizes in a typical Lanczos calculation. Tables and plots of the computed quantities are presented along with extrapolated values using standard algorithms.

ÍNDICE

Introdução.....	1
Capítulo 1 - Aspectos Gerais de Modelos Físicos em Redes Cristalinas.....	9
1.1 - Modelo de Heisenberg-Ising.....	11
1.2 - Ansatz de Bethe.....	13
1.3 - Mapeamentos.....	20
1.4 - Finite-Size Scaling.....	26
1.5 - Métodos Numéricos.....	32
Capítulo 2 - Métodos de Cálculo.....	37
2.1 - Representação Computacional do Hamiltoniano.....	38
2.2 - Método de Lanczos.....	41
2.3 - Técnica de Hashing.....	46
2.4 - Algoritmos de Extrapolação.....	49
Capítulo 3 - Leis de Escala na Região Anisotrópica.....	57
3.1 - Autovalores e Efeitos de Tamanho.....	58
3.2 - Lei de Escala para o Gap de Massa.....	62
Capítulo 4 - Leis de Escala no Ponto Isotrópico.....	76
4.1 - Determinação Numérica da Velocidade da Onda de Spin.....	78
4.2 - Correções Logarítmicas aos Autovalores.....	79
Capítulo 5 - Estrutura do Estado Fundamental e Funções de Correlação.....	86
5.1 - Função de Onda do Estado Fundamental.....	87
5.2 - Funções de Correlação e Magnetização Espontânea.....	89

Conclusões.....	95
Referências.....	99
Apêndice 1 - Valores Exatos para as Energias do Estado Fundamental e do Primeiro Estado Excitado.....	107
Apêndice 2 - Exemplo de um Processo de Extrapolação Usando o Algoritmo VBS.....	125
Apêndice 3 - Funções de Correlação no Ponto Isotrópico.....	128

INTRODUÇÃO

O estudo de sistemas magnéticos em baixa dimensionalidade é um dos mais fascinantes campos de pesquisa na moderna mecânica estatística. Investigações teóricas de modelos em uma ou duas dimensões, não somente facilitam o entendimento da física do nosso familiar mundo tridimensional, mas são interessantes de *per se*. Há sistemas reais cuja própria estrutura efetivamente reduz sua dimensão e para os quais a física de baixa dimensionalidade é um pré-requisito indispensável [1].

A motivação inicial ao estudo de cadeias magnéticas, era o grande número de importantes problemas na física de muitos corpos extremamente difíceis de serem tratados em três dimensões, mas que se tornavam solúveis em uma dimensão. Esta enorme dificuldade levou ao desenvolvimento de uma variedade de técnicas aproximadas para resolver problemas em fenômenos cooperativos e um bom teste eram comparações com resultados exatos obtidos para modelos unidimensionais. Para alguns sistemas, tais técnicas aproximadas mostraram-se imprecisas, quantitativa e mesmo qualitativamente; suas falhas sendo mais acentuadas para baixa dimensão e baixo valor de spin [2].

Vários desenvolvimentos experimentais e teóricos nas últimas décadas fizeram da "física unidimensional" um assunto mais interessante e útil. Em primeiro lugar, uma considerável quantidade de materiais foram descobertos e sintetizados, cujas propriedades são em grande parte dominadas por efeitos unidimensionais. Estes espécimes consistem de grandes cadeias moleculares cujos átomos interagem fortemente ao longo da cadeia.

Grupos atômicos ou moléculas intercaladas reduzem a interação intercadeias a ordens de magnitude da interação intracadeia, desta forma efetivamente isolando cada cadeia das outras [1]. Em segundo lugar, a moderna teoria de transições de fases tem mostrado que a dimensão espacial é crucial no comportamento de flutuações no equilíbrio. Os fenômenos cooperativos de sistemas com muitos corpos dependem fortemente do número de coordenação das partículas e portanto da dimensionalidade. Em geral, quando a dimensão espacial de um sistema físico diminui, efeitos de flutuações tornam-se relativamente mais importantes, devido ao fato de que o número de caminhos entre dois sítios decresce enormemente. Em uma dimensão, há somente um caminho entre dois átomos da cadeia e flutuações em qualquer sítio destrói a ordem entre as duas metades do sistema. Assim, não há ordem de longo alcance em uma cadeia com interações de primeiros vizinhos, para qualquer temperatura acima do zero absoluto [3].

Nos sistemas quânticos, a não comutatividade dos operadores (ligada ao Princípio da Incerteza) implica na existência de flutuações puramente quânticas, que à temperatura finita coexistem com as flutuações térmicas. Quando a temperatura é suficientemente baixa começa a aparecer o papel dominante das flutuações quânticas. O sistema experimenta uma mudança de um comportamento crítico clássico a temperaturas altas, para um comportamento crítico controlado pelas flutuações quânticas à temperatura nula, quando fazemos variar algum parâmetro característico do sistema. Dentre os modelos quânticos, o Hamiltoniano proposto por

Heisenberg [4] para o magnetismo tem atraído a atenção de um grande número de pesquisadores devido à sua importância teórica e experimental [5,6]. No entanto, muitas questões importantes continuam em aberto e mesmo em sistemas unidimensionais vários problemas carecem de uma resposta definitiva [7].

A descoberta dos supercondutores de alta temperatura crítica [8], trouxe uma nova razão à pesquisa em magnetismo de baixa dimensionalidade. Parte deste interesse está relacionado à idéia de que o mecanismo para supercondutividade é de origem magnética [9]. Experiências têm mostrado que os compostos protótipos são isolantes antiferromagnéticos, tendo como aspecto comum um arranjo de planos de óxido de cobre fracamente acoplados, os quais são os únicos exemplos de um antiferromagneto de Heisenberg quase-bidimensional com spin $s = 1/2$. Os materiais dopados apresentam buracos ou elétrons adicionais nos planos de óxido de cobre, e para uma concentração suficiente de dopantes, a ordem magnética dá lugar à supercondutividade [10]. O problema básico é entender o comportamento de portadores de carga se movendo em um meio antiferromagneticamente correlacionado e encontrar o mecanismo e teoria de muitos corpos do estado supercondutor [11]. Aparece então como um passo fundamental, uma descrição detalhada e confiável da fase isolante altamente correlacionada destes materiais, antes de se considerar efeitos de dopagem. Isto implica na necessidade de um melhor entendimento do estado fundamental, e de suas excitações, para sistemas de Heisenberg com interações antiferromagnéticas. Apesar de uma aparência simples, o

Hamiltoniano de Heisenberg apresenta intrigantes propriedades, mesmo para baixa dimensão e baixo valor de spin. Nestes limites, grandezas físicas são muito suscetíveis às flutuações quânticas, as quais podem em alguns casos suprimir qualquer transição de fases.

Em vários materiais magnéticos quase-unidimensionais, tais como os compostos $\text{Cu}(\text{NH}_3)_4\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (monohidrato sulfato de cobre tetramina) e $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{N} \cdot \text{C}_5\text{H}_5$ (dicloro-bi-piridina cobre II), os dados experimentais podem ser entendidos a partir do modelo de Heisenberg com spin $s = 1/2$ [12,13]. Mesmo ignorando este fato, cadeias de spin quânticas são de um ponto de vista teórico de grande interesse, por serem um dos sistemas mais simples que apresentam efeitos não triviais de muitos corpos, onde as flutuações quânticas têm um papel vital [14], e por poderem ser mapeadas em vários modelos clássicos bidimensionais [15] e teorias de campo em (1+1) dimensões [16].

A solução exata de Bethe [17] para a cadeia de Heisenberg permanece como uma das mais notáveis descobertas da moderna física matemática, e tem inspirado um novo campo de pesquisa dentro das teorias integráveis baseadas no então chamado *ansatz* de Bethe [18]. Infelizmente este tratamento é extremamente complicado e resultados analíticos fechados tem sido obtidos somente para casos particulares ou dentro de esquemas aproximados [19]. Até mesmo o cálculo da energia do estado fundamental não é fácil, e foi realizado somente sete anos após Bethe ter proposto a forma da função de onda [20].

No contexto da mecânica estatística, é de grande interesse o conhecimento de como o comportamento limite de sistemas infinitos é aproximado por sistemas finitos. Atualmente, tal compreensão é particularmente importante, já que o advento de computadores com grande capacidade de memória e alta velocidade de processamento tornou factível cálculos exatos em modelos finitos de muitos tipos de sistemas físicos. No que concerne às cadeias de Heisenberg finitas, soluções usando o *ansatz* de Bethe levam a equações transcendentais acopladas, as quais são extremamente difíceis de manusear analiticamente. Algumas estimativas assintóticas de correções de tamanho foram obtidas para finitas, mas grandes cadeias, usando o método do ponto sela [21,22]. No regime crítico, técnicas do grupo conforme também podem ser usadas para determinar efeitos de tamanho [23,24]. Na maioria das vezes a investigação numérica é necessária, seja como método de cálculo direto ou para testar soluções analíticas aproximadas. Por sua própria natureza, simulações computacionais são realizadas para finitas, mas relativamente pequenas amostras. No entanto, através das técnicas de *finite-size scaling* [25], dados obtidos para sistemas de tamanho N , podem ser usados para inferir o comportamento dos sistemas no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$).

O objetivo deste trabalho é estudar, usando métodos numéricos, os efeitos de tamanho em cadeias de Heisenberg-Ising com interações antiferromagnéticas. Dados novos e muito precisos foram obtidos para interessantes quantidades físicas, tais como a energia do estado fundamental, gap de massa (*mass gap*) e

velocidade da onda de spin. Nós também investigamos a estrutura da função de onda do estado fundamental e computamos as funções de correlação. O cálculo foi baseado sobre uma eficiente variação do método de Lanczos [26] elaborada por Paige [27], sendo $N = 28$ o maior tamanho computado. Algumas das conclusões do nosso estudo foram comunicadas na literatura [28-32].

Nossos resultados mostram que o gap de massa fecha-se exponencialmente com o tamanho em toda a região anisotrópica, mas correções de lei de potência tornam-se cada vez mais importantes à medida que nos aproximamos do limite isotrópico [29,31,32], como predito por argumentos analíticos usando o *ansatz* de Bethe [21]. No limite termodinâmico, o estado fundamental é duplamente degenerado e o sistema apresenta ordem de longo alcance. Para o regime fortemente anisotrópico, a natureza deste estado é essencialmente tipo Néel, mas flutuações quânticas reduzem o momento magnético como função da anisotropia [28,32]. No ponto isotrópico, o sistema sofre uma transição de fases a temperatura nula: o estado fundamental torna-se um singlete sem ordem de longo alcance, mas com correlações que decaem lentamente (quase ordem de longo alcance). Neste regime crítico, os efeitos de tamanho tornam-se logarítmicos [30], em concordância com predições obtidas pelo *ansatz* de Bethe [22] e por argumentos do grupo conforme [23,24], fazendo então difícil extrapolações baseadas sobre *finite-size scaling*. No entanto, mesmo neste último caso, uma combinação de aproximações analíticas com o tratamento apropriado dos dados numéricos, pode levar a uma correta compreensão sobre o

comportamento da cadeia infinita [30].

Uma etapa muito importante deste trabalho, foi o desenvolvimento de algoritmos computacionais para cálculos exatos de modelos estatísticos quânticos em redes cristalinas. Estas técnicas não são triviais e constituem uma arte em si mesmas, envolvendo muitas vezes a manipulação de grandes matrizes e sofisticados métodos de análise numérica. Vale salientar, que isto não é apenas um problema de computação, pois para uma eficiente implementação, os conceitos físicos precisam estar embutidos na arquitetura do programa, sendo indissociável um aspecto do outro.

Este texto está organizado da seguinte maneira. Inicialmente discutimos no capítulo 1 aspectos gerais de modelos físicos em redes cristalinas, enfatizando particularmente a cadeia de Heisenberg-Ising. Soluções analíticas obtidas via o *ansatz* de Bethe são apresentadas e técnicas numéricas de cálculo são comparadas. Os métodos de cálculo específicos empregados em nosso trabalho são examinados em detalhes no capítulo 2. Análise dos resultados para a energia e gap de massa em toda região anisotrópica são feitas no capítulo 3, juntamente com discussões sobre leis de escala. Correções de tamanho no ponto crítico são estudadas no capítulo 4, para a energia, gap de massa e velocidade da onda de spin. No capítulo seguinte a estrutura da função de onda e a ordem de longo alcance do estado fundamental são investigadas. Por fim, um sumário dos nossos resultados é apresentado nas conclusões.

CAPÍTULO 1

ASPECTOS GERAIS DE MODELOS FÍSICOS
EM REDES CRISTALINAS

Muitas propriedades de vários materiais magnéticos quase-unidimensionais [1] podem ser explicadas pelo Hamiltoniano de Heisenberg [4]. Tratamentos analíticos usando o *ansatz* de Bethe [17], juntamente com engenhosos mapeamentos em modelos clássicos bidimensionais [15] e de teorias de campo em (1+1) dimensões [16], trouxeram grandes progressos ao estudo de cadeias de spin quânticas. As soluções deste *ansatz* formam um conjunto de equações transcendentais acopladas cujas raízes determinam os autovalores da teoria. No limite termodinâmico o número de equações e raízes tendem ao infinito e as equações de Bethe tornam-se equações integrais lineares para a densidade de raízes e podem ser resolvidas por transformadas de Fourier [20].

Atualmente há um grande interesse no estudo de sistemas finitos, principalmente devido ao aparecimento da técnica de *finite-size scaling* [25]. Esta é um método confiável de extrair informações acerca do comportamento de sistemas no limite termodinâmico a partir da solução de modelos em redes finitas. Um passo importante nesta direção foi dado por de Vega e Woynarovich [21] ao elaborarem um procedimento para calcular sistematicamente as correções de tamanho, para a energia do estado fundamental e dos estados excitados, de qualquer modelo solúvel pelo *ansatz* de Bethe. Basicamente eles mostraram que uma equação integral também pode ser escrita para o caso da rede finita de uma forma muito similar ao da rede infinita, mas com um termo de correção. O comportamento assintótico deste termo de correção quando o tamanho da rede vai ao infinito pode ser derivado analiticamente [21,22].

Na região crítica, o comportamento universal do sistema infinito se deve à divergência do comprimento de correlação; conseqüentemente, sob uma transição de fases de segunda ordem um sistema físico é invariante a transformações de escala. Para interações de curto alcance e simetrias de translação e rotação, o grupo de transformações pode ser aumentado e também englobar mudanças locais de escala. Estas são transformações que conservam ângulos locais e constituem o grupo conforme [33]. Neste caso, correções de tamanho tem um caráter universal e podem ser calculadas pela invariância conforme [23,24,33].

Apesar de sofisticados, estes métodos analíticos tem limites de aplicabilidade e muitas vezes não podem ser usados para determinar certas grandezas físicas importantes, tais como funções de correlação. Cálculos computacionais aparecem então como uma ferramenta de pesquisa indispensável e em alguns casos como a única disponível.

Nas próximas seções discutiremos alguns resultados experimentais e aproximações teóricas. Enfocaremos sobretudo a cadeia de Heisenberg-Ising com spin $s = 1/2$, candidata natural para testar muitas destas idéias.

1.1 - Modelo de Heisenberg-Ising

Em isolantes antiferromagnéticos quase-unidimensionais, a parte magnética do Hamiltoniano é bem representada como um conjunto de spins \vec{S}_i localizados com interações de primeiros

vizinhos [6]. Para alguns sistemas altamente anisotrópicos, a energia de acoplamento pode ser aproximada pelo modelo de Ising [34], enquanto em outros sistemas efeitos de anisotropia são desprezíveis e o acoplamento de Heisenberg [4] é mais realístico. Situações intermediárias entre estes extremos são bem descritas pelo Hamiltoniano de Heisenberg-Ising:

$$\mathcal{H} = J \sum_m \left\{ S_z(m)S_z(m+1) + \alpha \left[S_x(m)S_x(m+1) + S_y(m)S_y(m+1) \right] \right\} \quad (1.1)$$

onde $J > 0$ é a constante de troca antiferromagnética e $S_x(m)$, $S_y(m)$, e $S_z(m)$ são os operadores de spin para $s = 1/2$ no sítio m . O parâmetro α leva em conta efeitos de anisotropia no acoplamento entre spins, sendo $\alpha = 0$ o limite de Ising e $\alpha = 1$ o limite de Heisenberg. A origem e magnitude desta anisotropia no Hamiltoniano efetivo é devida a efeitos de campo cristalino [6].

A relevância dos modelos magnéticos unidimensionais para sistemas físicos reais, foi pela primeira vez apontada por Griffiths [12] em 1964. Ele mostrou que dados experimentais para a suscetibilidade magnética e para o calor específico do composto quase-unidimensional $\text{Cu}(\text{NH}_3)_4\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, estavam em excelente concordância com resultados teóricos obtidos para a cadeia de Heisenberg antiferromagnética com spin $s = 1/2$. Novos estímulos ao campo da física unidimensional, vieram de engenhosas soluções analíticas e numéricas para uma grande variedade de problemas em cadeias de spin quânticas [7]. Estes importantes avanços foram

acompanhados de realizações experimentais destes modelos físicos e pelo desenvolvimento de elaboradas técnicas de medição [1].

1.2 - Ansatz de Bethe

O problema da cadeia de N spins $s = 1/2$ acoplados com interações efetivas do tipo Heisenberg [4] é um dos raros problemas na física de muitos corpos que foi resolvido exatamente. Investigações teóricas sobre este modelo levaram a importantes conceitos que foram generalizados para sistemas com dimensões mais altas [5]. Um destes conceitos foi o da onda de spin, introduzido por Bloch em 1930 [35]. A solução exata foi dada por Bethe em 1931 [17], quando propôs uma forma específica para todos os autovetores e do seu *ansatz* derivou um conjunto de equações, das quais os autovalores e demais quantidades físicas podem em princípio ser encontrados.

O Hamiltoniano de Heisenberg comuta com a componente $S_z = \sum_{m_z} s_z(m)$ do spin total, portanto existe uma base ortonormal de autovetores comuns a S_z e a \mathcal{H} . Seja $|m_1, m_2, \dots, m_r\rangle$ um autoestado de S_z no qual a componente s_z dos spins m_1, m_2, \dots, m_r esteja virada em relação à do estado ferromagnético (estado de referência). Qualquer autoestado de \mathcal{H} com $S_z = \frac{N}{2} - r$, pode ser escrito como uma combinação linear dos estados $|m_1, \dots, m_r\rangle$,

$$|\psi\rangle = \sum_{m_1, \dots, m_r} a(m_1, \dots, m_r) |m_1, \dots, m_r\rangle \quad (1.2)$$

onde a soma é sobre todas as $\binom{N}{r}$ distintas configurações obtidas de r spins virados em uma cadeia de N spins. Inserindo (1.2) na equação de Schrödinger,

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1.3)$$

encontramos a seguinte relação entre os coeficientes $a(m_1, \dots, m_r)$:

$$2\epsilon a(m_1, \dots, m_r) + \sum_{\substack{m'_1 < \dots < m'_r \\ m'_i \neq m_i}} a(m'_1, \dots, m'_r) - a(m_1, \dots, m_r) = 0 \quad (1.4)$$

onde,

$$\epsilon = - (2J)^{-1} \left[E - \frac{1}{2} JN \right] \quad (1.5)$$

e a soma é sobre todas as configurações m'_1, \dots, m'_r obtidas da configuração m_1, \dots, m_r pela inversão de um par de spins vizinhos antiparalelos. Para a equação secular (1.4) ser também válida no caso de spins virados que sejam vizinhos, é necessário a condição subsidiária:

$$a(m_1, \dots, m_j, m_j, \dots, m_r) + a(m_1, \dots, m_j+1, m_j+1, \dots, m_r) - 2a(m_1, \dots, m_j, m_j+1, \dots, m_r) = 0 \quad (1.6)$$

já que para spins $s = 1/2$, $a(\dots, m_j, m_j, \dots)$ e $a(\dots, m_j+1, m_j+1, \dots)$

não têm sentido físico. Condições de contorno periódicas implicam na seguinte relação entre as amplitudes:

$$a(m_1, m_2, \dots, m_r) = a(m_2, \dots, m_r, m_1 + N) \quad (1.7)$$

Começando com um estado em que todos os spins estejam alinhados (estado ferromagnético), e virando sucessivamente um spin, dois spins, etc., uma forma para os coeficientes $a(m_1, \dots, m_r)$, de uma cadeia com um número arbitrário r de spins virados, emerge naturalmente. Seguindo este procedimento, Bethe propôs o seguinte *ansatz*:

$$a(m_1, \dots, m_r) = \sum_{P=1}^{r!} \exp \left\{ i \left[\sum_{j=1}^r k_{P_j} m_j + \frac{1}{2} \sum_{j < l} \varphi_{P_j, P_l} \right] \right\} \quad (1.8)$$

onde o somatório em P é sobre todas as $r!$ permutações dos números de onda k_1, \dots, k_r ; e P_j é o número que, depois da permutação P , fica no lugar de j . Inserindo (1.8) na equação secular (1.4) verifica-se que o *ansatz* é realmente uma solução, com a energia dada por:

$$\epsilon = \sum_{j=1}^r (1 - \cos k_j) \quad (1.9)$$

A fase φ_{j_l} é obtida substituindo (1.8) na condição (1.6),

$$2 \cot \left(\frac{\varphi_{jl}}{2} \right) = \cot \left(\frac{k_j}{2} \right) - \cot \left(\frac{k_l}{2} \right) \quad , \quad -\pi \leq \varphi_{jl} \leq \pi \quad (1.10)$$

enquanto os números de onda k_j são determinados pela condição de periodicidade (1.7),

$$Nk_j = 2\pi\lambda_j + \sum_{l(l \neq j)} \varphi_{jl} \quad , \quad \lambda_j = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (1.11)$$

Para cadeias finitas, é extremamente difícil manusear analiticamente o conjunto de equações transcendentais acopladas (1.10) e (1.11). No limite $N \rightarrow \infty$ os (k_j) tornam-se densos e variáveis contínuas podem ser introduzidas. Neste caso, Hulthén [20] mostrou que as equações de Bethe convertem-se em equações integrais lineares, podendo assim ser resolvidas por transformadas de Fourier. Desta maneira ele calculou exatamente a energia do estado fundamental da cadeia antiferromagnética (onde $r = N/2$), cujo valor por spin e em unidades de J , é dado por:

$$E_0 = -\ln 2 + \frac{1}{4} \quad (1.12)$$

Posteriormente, Marshall [36] mostrou que este estado é um singleto.

Orbach [37] estendeu os argumentos de Bethe e Hulthén para a cadeia anisotrópica do tipo Heisenberg-Ising e obteve a energia do estado fundamental resolvendo numericamente uma equação integral. Usando uma expansão de Fourier, Walker [38] encontrou uma solução

analítica em séries de potências para a integral de Orbach, a qual revela que a energia $E_0(\alpha)$ do antiferromagneto,

$$E_0(\alpha) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} - \operatorname{tanh} \gamma \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4}{e^{2n\gamma} + 1} \right) \right] \quad (1.13)$$

com,

$$\operatorname{sech} \gamma = \alpha \quad , \quad \gamma > 0 \quad (1.14)$$

tem uma singularidade essencial em $\alpha = 1$, o ponto de Heisenberg.

Em um importante trabalho, dos Cloizeaux e Pearson [39] determinaram o primeiro estado excitado para cada número de onda q do Hamiltoniano isotrópico ($\alpha = 1$, simetria contínua), e calcularam exatamente suas energias, ou seja, o espectro da onda de spin. Estes estados são triplamente degenerados [40], com uma energia de excitação $\mu(\alpha, S_z, q)$, medida em relação ao estado fundamental, dada por:

$$\mu(1, 1, q) = \mu(1, -1, q) = \mu(1, 0, q) = \frac{\pi}{2} |\operatorname{sen}(q)| \quad (1.15)$$

onde,

$$q = k - k_0 \quad (1.16)$$

e k_0 é o valor de k associado com o estado fundamental ($k_0 = 0$ se

$N/2$ for par; $k_0 = \pi$ se $N/2$ for ímpar). Devemos notar que não há gap [$\mu(1, S_z, 0) = 0$].

A generalização deste resultado para a cadeia XXZ foi obtida por des Cloizeaux e Gaudin [41]. Eles mostraram que na região de anisotropia planar ($\alpha > 1$, simetria contínua), os estados de spin de momento q , correspondendo aos três possíveis valores de S_z , são degenerados [$\mu(\alpha, \pm 1, q) = \mu(\alpha, 0, q)$] e não há gap [$\mu(\alpha, S_z, 0) = 0$]. Na região de anisotropia axial ($0 \leq \alpha < 1$, simetria discreta), não há gap para o estado de spin correspondendo a $S_z = 0$ [$\mu(\alpha, 0, 0) = 0$], mas um gap, independente de q , aparece para as outras excitações: [$\mu(\alpha, \pm 1, q) = \mu(\alpha, 0, q) + G(\alpha)$]. A magnitude de $G(\alpha)$ é:

$$G(\alpha) = \frac{\pi \operatorname{senh} \gamma}{\gamma} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}[(2n+1)\pi^2/2\gamma] \quad (1.17)$$

onde γ é dado por (1.14). Para $\alpha \rightarrow 1$, o gap comporta-se como:

$$G(\alpha) \underset{\alpha \rightarrow 1}{\approx} 4\pi \exp\left\{-\frac{\pi^2}{2} \left[2\left(\frac{1}{\alpha} - 1\right)\right]^{1/2}\right\} \quad (1.18)$$

A validade das hipóteses de Bethe para o estado fundamental foram rigorosamente estabelecidas por Yang e Yang [42]. Eles também obtiveram uma solução detalhada para a energia como função da anisotropia e da magnetização, assim generalizando para todo α o resultado analítico da suscetibilidade encontrado por Griffiths [43] no caso isotrópico. Outro importante resultado foi o cálculo do chamado gap escalado $NG(\alpha)$, onde o gap entre o nível fundamental e o primeiro excitado é escalado pelo tamanho N da

cadeia. No ponto de Heisenberg ele é dado simplesmente por:

$$NG(1) = \pi^2/2 \quad (1.19)$$

um valor já anteriormente conjecturado por Griffiths [43]. Em particular, Yang e Yang provaram que para N e r finitos, o estado fundamental é não degenerado para qualquer valor real de α . Neste caso, a energia do estado fundamental é analítica em α .

Finalmente, 42 anos após Bethe ter sugerido a forma das autofunções, Baxter [44] calculou a magnetização espontânea alternante (*staggered*),

$$M_o(\alpha) = \frac{2\pi}{\gamma} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[- \left(n - \frac{1}{2} \right)^2 \frac{\pi^2}{2\gamma} \right] \right\}^2 \quad (1.20)$$

onde γ é definido como em (1.14). Quando α varia de 0 até $\alpha_c = 1$, a magnetização espontânea de subrede $M_o(\alpha)$ decresce do seu valor unitário até zero. Perto de α_c ,

$$M_o(\alpha) \underset{\alpha \rightarrow 1}{\asymp} \left(\frac{2\pi}{\gamma} \right) \exp \left[- \frac{\pi^2}{4\gamma} \right] \quad (1.21)$$

Notemos que ambos, o gap $G(\alpha)$ e a magnetização $M_o(\alpha)$, vão a zero exponencialmente quando $\alpha \rightarrow 1$. De fato, o ponto $\alpha = 1$ é a localização de uma singularidade essencial para estas, e também para outras quantidades físicas.

Todos estes resultados foram obtidos no limite de tamanho $N \rightarrow$

∞ e a temperatura $T = 0$. O cálculo de propriedades à temperatura finita apresenta muitos problemas, e apesar de alguns progressos terem sido realizados, ainda não existe uma formulação analítica completa [7]. No entanto, o aspecto mais surpreendente destes estudos, é que a cadeia de Heisenberg com $s = 1/2$, um aparente exercício matemático começado por Bloch e Bethe no início dos anos 30, tenha realmente sido testada e elucidada em grande detalhe por experimentos em materiais reais. Como um exemplo ilustrativo, a figura 1.1 mostra dados experimentais para a relação de dispersão da primeira excitação no composto $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{N}_2\text{H}_4$ [13], comparado com o resultado teórico (eq. 1.15). É gratificante observar a excelente concordância entre teoria e experiência. Na figura 1.2 o espectro das excitações em função do parâmetro de anisotropia α é mostrado (eq. 1.17 e 1.18). Experimentalmente é extremamente difícil resolver os efeitos devido à anisotropia de outros relacionados às impurezas, inomogeneidades, etc.

1.3 - Mapeamentos

Um tópico de grande interesse em física estatística é o estudo de mapeamentos ou isomorfismos matemáticos entre cadeias de spin quânticas, incluindo seus vários casos limites, e outros modelos em uma ou mais dimensões (modelos fermiônicos [45], oito vértices [46], Potts e Ashkin-Teller [47]; modelos de teoria de campo tais como: Tomonaga-Luttinger [48], seno-Gordon [49], ϕ não-linear [50], etc.). Em particular, McCoy e Wu [51] mostraram

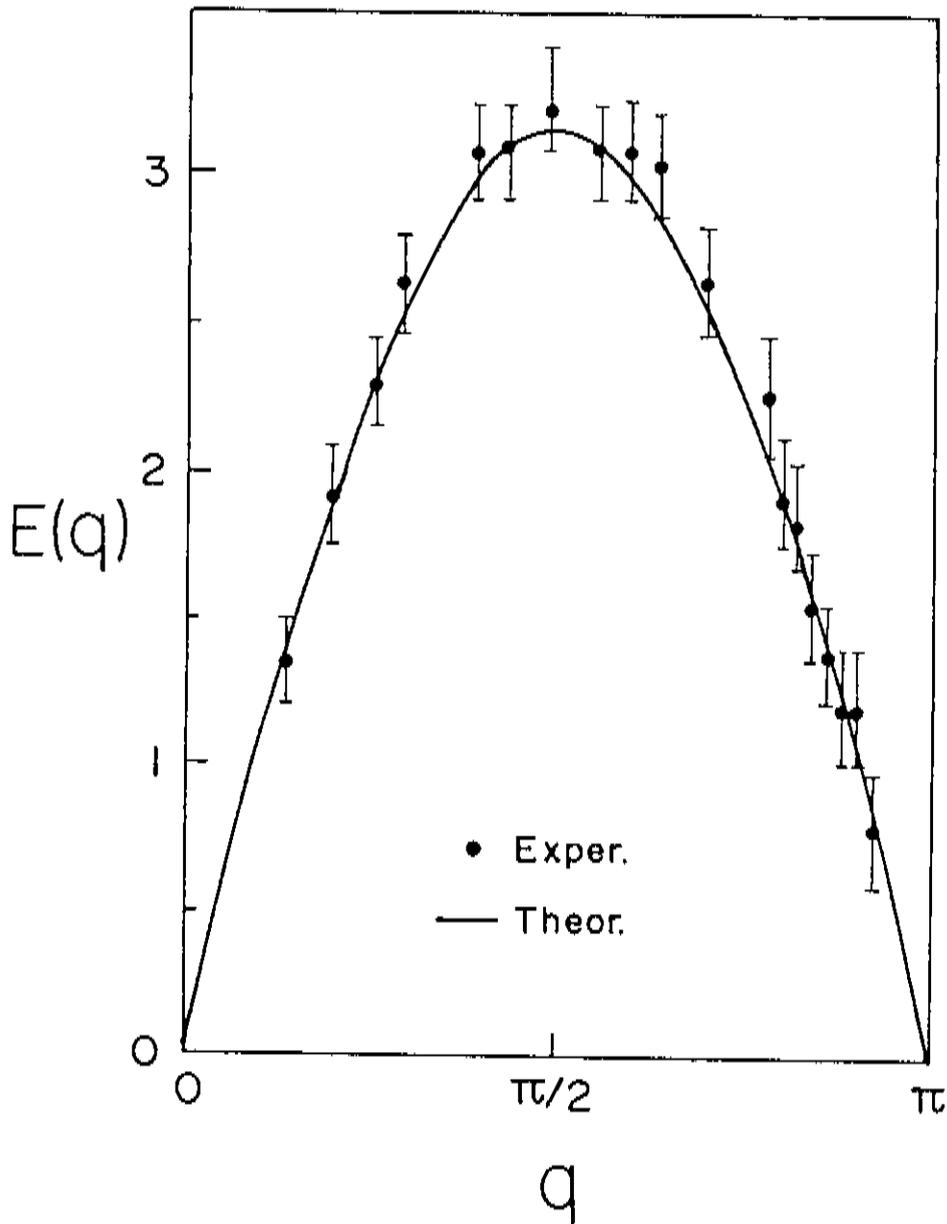


Figura 1.1 - Relação de dispersão energia $E(q)$ versus momento q da primeira excitação para a cadeia de Heisenberg isotrópica. Os pontos indicam dados experimentais obtidos para o composto quase-unidimensional $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{N} \cdot \text{C}_5\text{H}_5$ (Ref. 13). A linha contínua é a solução analítica para a onda de spin do sistema infinito (Ref 39). Energias são dadas em unidades de J .

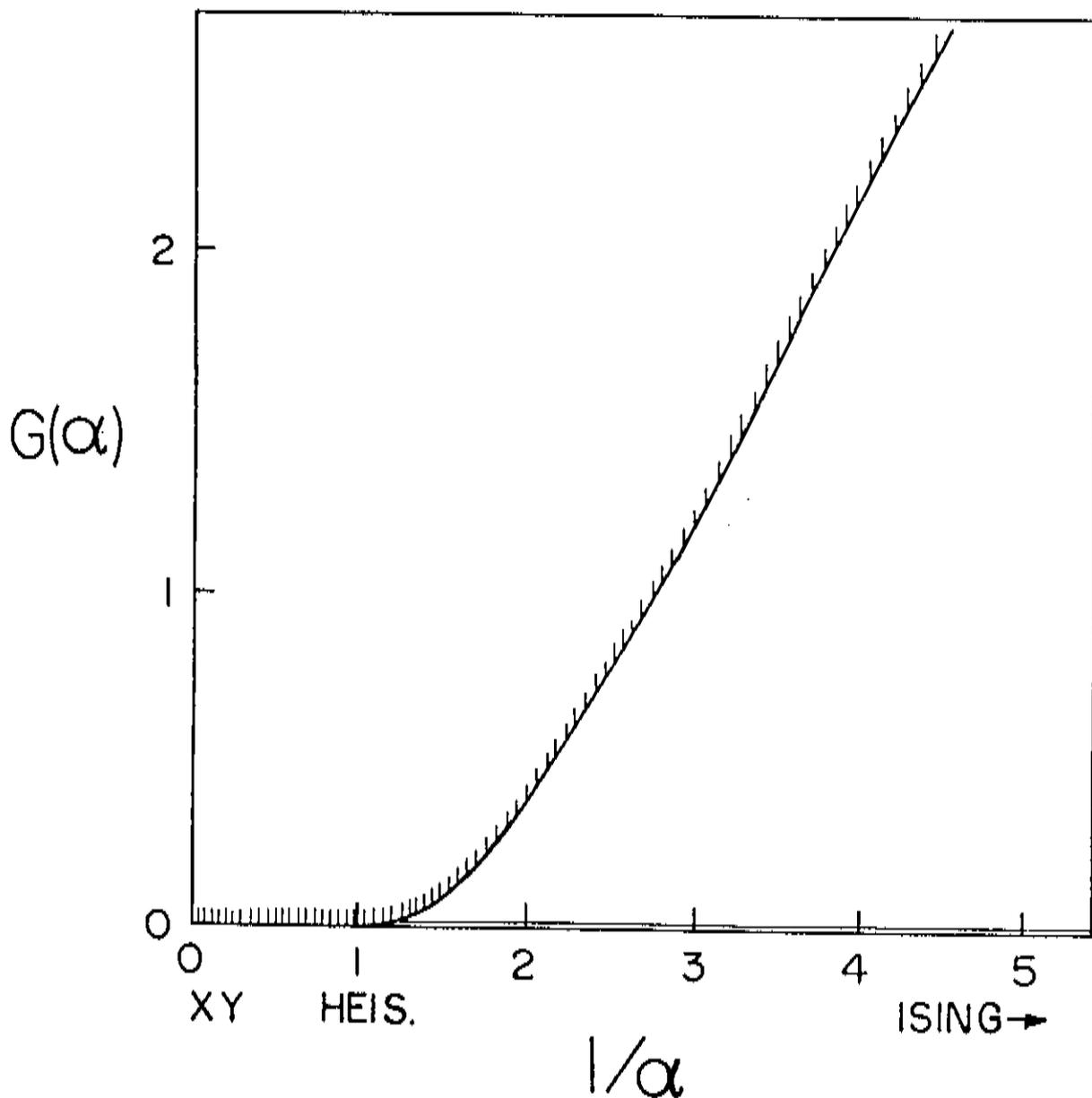


Figura 1.2 - Gap de massa $G(\alpha)$ para a cadeia infinita de Heisenberg XXZ. Em toda a fase XY, assim como no ponto isotrópico, o estado fundamental é um singlete. Para estes valores da anisotropia α não há gap. No regime tipo Ising, o estado fundamental é duplamente degenerado, estando separado do contínuo das excitações por um gap. (Adaptado da referência 41).

que dado um modelo bidimensional de seis vértices arbitrário, existe um Hamiltoniano XXZ generalizado unidimensional (não-Hermitiano), o qual comuta com a matriz de transferência do modelo de seis vértices. Foi investigando um caso especial deste modelo, o chamado modelo \mathcal{F} [52], que Baxter [44] derivou através do mapeamento apropriado, a magnetização espontânea por subrede da cadeia de Heisenberg-Ising. O parâmetro de anisotropia α do Hamiltoniano (1.1) faz o papel da temperatura T . Para $0 \leq \alpha < \alpha_c$ ($T < T_c$) o sistema tem ordem de longo alcance e uma transição de fases de segunda ordem ocorre para $\alpha_c = 1$ ($T = T_c$).

Em geral, a analogia é entre sistemas estatísticos clássicos em d -dimensões a temperatura finita e sistemas Hamiltonianos quânticos em $(d-1)$ -dimensões e $T = 0$; a temperatura sendo absorvida pelas constantes de acoplamento do Hamiltoniano quântico. O mapeamento procede via o fato de que a matriz de transferência \mathcal{T} de uma classe comuta com o operador Hamiltoniano \mathcal{H} da outra classe; de modo que o problema de determinar o maior autovalor Λ_0 (energia livre) de \mathcal{T} é similar ao de encontrar o menor autovalor E_0 (energia do estado fundamental) de \mathcal{H} [15].

Um sistema clássico perto do ponto crítico de uma transição de segunda ordem, tem flutuações de origem térmica sobre todas as escalas de comprimento, até o comprimento de correlação ξ , o único comprimento relevante no problema. Exatamente no ponto crítico ξ diverge e o sistema fica invariante sob transformações de escala. Para sistemas quânticos à temperatura $T = 0$, as flutuações quânticas jogam um papel análogo ao das flutuações térmicas de

sistemas clássicos em temperatura finita. Isto sugere a existência de transições de fases de segunda ordem, induzidas pelas flutuações quânticas, ao se variar algum parâmetro característico do sistema (o campo ordenante). Comparando transições de fases em sistemas clássicos e quânticos, podemos identificar quantidades que têm um papel semelhante em cada sistema, como indicado no dicionário abaixo, para algumas destas grandezas:

Clássico, $T > 0$	Quântico, $T = 0$
d-Dimensões espaciais	(d-1)-Dimensões espaciais e uma temporal
Flutuações térmicas	Flutuações quânticas
Energia livre	Energia do estado fundamental
Inverso do comprimento de correlação	Gap de energia
Médias sobre ensemble	Valores esperados no estado fundamental
Temperatura	Campo ordenante

Esta equivalência pode ser também formulada entre a mecânica estatística de equilíbrio e uma teoria quântica de campo, quando estivermos tratando de um número infinito de graus de liberdade. Isto se deve à formulação da integral de trajetória de Feynman [53], a qual pode ser igualmente usada para calcular a função de partição de modelos de rede clássicos, assim como propagadores quânticos em teoria de campo. Ambos os problemas são matematicamente equivalentes quando um tempo Euclidiano discreto é introduzido na evolução temporal dos estados quânticos. Uma das

d -dimensões espaciais da rede é associada ao tempo, e a matriz de transferência da mecânica estatística, operando ao longo do mesmo eixo, torna-se o operador de evolução temporal de um sistema quântico em $(d-1)$ -dimensões. A tarefa de encontrar o correspondente operador Hamiltoniano é geralmente complexa [16].

Uma versão Hamiltoniana simples pode ser obtida para um particular, mas singular caso, a qual corresponde a tomar o limite contínuo ao longo da direção temporal (a constante de rede no eixo do tempo vai a zero). Para manter a mesma física, uma mudança na escala da rede, deve vir acompanhada por uma correspondente renormalização dos parâmetros de acoplamento. Para compensar a total compressão da rede ao longo da direção temporal, o correspondente parâmetro de acoplamento deve tender ao infinito. Acoplamentos ao longo das outras direções são reduzidas a zero em um caminho extremamente anisotrópico e delicado. No fim do processo, flutuações térmicas em modelos de rede clássicos são substituídas pelas flutuações quânticas no modelo Hamiltoniano; advindas da não comutatividade dos diferentes operadores que aparecem na versão Hamiltoniana (Princípio de Incerteza). Simultaneamente, a dimensão é reduzida de d para $(d-1)$ [54].

Desde que o espaçamento da rede é tido como um parâmetro irrelevante em qualquer transição de fases, espera-se que o limite contínuo envolvido na definição do Hamiltoniano não afete os aspectos universais do comportamento crítico e que portanto ambas as versões exibam a mesma estrutura de singularidades críticas. A transição é monitorada pelo comprimento de correlação em sistemas

clássicos e pelo gap de massa em suas versões quânticas. Usando a linguagem da teoria de campo, mostramos abaixo algumas equivalências entre quantidades e operadores obtidos a partir de versões Hamiltonianas quânticas de modelos estatísticos clássicos:

Mecânica Estatística Clássica

Teoria Quântica de Campo

Matriz de transferência

Operador de evolução temporal

Estado de equilíbrio

Estado do vácuo

Densidade de energia livre

Densidade de energia do vácuo

Função de correlação

Propagador

Inverso do comprimento de
correlação

Gap de massa

Hamiltonianos quânticos podem ser definidos para muitos sistemas estatísticos [16]. Com exceção de alguns poucos modelos, estes Hamiltonianos não são diagonalizados exatamente por métodos analíticos, e estudos de seus diagramas de fases devem ser feitos por cálculos numéricos. Tal procedimento obviamente restringe o Hamiltoniano a redes finitas, para o qual uma matriz finita pode ser construída e explicitamente diagonalizada. Usando as técnicas de *finite-size scaling*, autovalores e demais grandezas físicas de interesse são extrapoladas ao limite da rede infinita.

1.4 - Finite-Size Scaling

Sistemas finitos não tem propriamente transição de fases.

Isto se deve ao fato de que a função de partição $Z(T,H;N)$ de qualquer sistema finito é uma função analítica da temperatura T e de campos externos H . Por exemplo, no caso da rede de Ising finita, $Z(T,H;N)$ é analítica porque é simplesmente a soma de um número finito, 2^N , de termos analíticos do tipo $\exp(k_b T)$, onde k_b é a constante de Boltzmann. Consequentemente, nenhuma das grandezas termodinâmicas obtidas diferenciando a energia livre $F = -k_b T \ln Z$ com respeito a T e a H , podem ter qualquer singularidade. Transições de fases somente ocorrem quando o limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) é tomado adequadamente ao longo de algumas direções do espaço. A dimensionalidade da transição de fases está associada com o número de dimensões infinitas da rede, e cruzamentos (*crossover*) da dimensionalidade podem ocorrer quando alguma dimensão finita é assintoticamente aumentada. Se o sistema é finito em todas as direções, ele é essencialmente zero-dimensional e não exibe comportamento singular.

Em sistemas de spins com típicas interações de curto alcance, a única forma de um dado spin perto do centro de uma amostra finita "sentir" o tamanho e a superfície é através da "informação" vinda do contorno, propagada passo a passo pelas correlações. Esta propagação é descrita pela função de correlação $W(l)$. No limite termodinâmico e longe do ponto crítico T_c , a função $W(l)$ decai exponencialmente a zero quando a distância l torna-se grande,

$$W(l) \sim \frac{e^{-l/\xi}}{l^\tau}, \quad l \rightarrow \infty \quad (1.22)$$

onde τ é um número arbitrário e ξ é o comprimento de correlação. ξ pode ser definido como a distância sobre a qual as flutuações estão correlacionadas. Ele é uma função de H e T , e seu valor torna-se infinito em T_c . De fato, esta propriedade de um comprimento de correlação infinito pode ser considerada como a marca de um ponto crítico. Assim,

$$\xi(T) \sim t^{-\nu} \quad , \quad t = \frac{T-T_c}{T_c} \rightarrow 0 \quad (1.23)$$

onde ν é o expoente crítico do comprimento de correlação.

No ponto crítico, a função de correlação $W(l)$ existe, mas em vez de decair exponencialmente, decai como uma lei de potência:

$$W(l) \sim l^{-d+\alpha-\eta} \quad (1.24)$$

onde d é a dimensão espacial e η é um expoente crítico.

Uma maneira prática de calcular o comprimento de correlação é através dos autovalores da matriz de transferência \mathcal{T} [55,56],

$$\xi = [\ln(\Lambda_0/\Lambda_1)]^{-1} \quad (1.25)$$

onde ξ é dado em unidades da constante de rede e Λ_0 e Λ_1 são o maior e o segundo maior autovalores de \mathcal{T} , respectivamente.

Na rede infinita e abaixo da temperatura crítica, o sistema tem uma quebra espontânea de simetria (fase ordenada). Os autovalores Λ_0 e Λ_1 da matriz de transferência são degenerados,

dando lugar à uma magnetização espontânea a qual engloba todo o sistema, caracterizando o que é conhecido como ordem de longo alcance. Neste caso, o comprimento de correlação do volume (bulk) ξ_{∞} é determinado pelo terceiro maior autovalor Λ_2 [55,56],

$$\xi_{\infty} = (\ln[\Lambda_0(\infty)/\Lambda_2(\infty)])^{-1} \quad (1.26)$$

Em contraste, um sistema finito não têm a simetria espontaneamente quebrada, e os dois maiores autovalores de \mathcal{T} não são degenerados. Eles definem um gap, o qual é chamado de gap de massa em analogia com a teoria de campo (ver seção 1.3). Este gap assintoticamente vai a zero quando o tamanho do sistema aumenta em direção ao infinito. Como consequência, para valores finitos de N não há magnetização espontânea mesmo a $T = 0$. A amostra quebra-se em domínios e a ordem de longo alcance é destruída. Neste caso o comprimento de correlação [55,56],

$$\xi_N = (\ln[\Lambda_0(N)/\Lambda_1(N)])^{-1} \quad (1.27)$$

tem um significado diferente em relação ao seu significado na rede infinita. Aqui, ξ_N mede o tamanho médio dos domínios.

Na formulação Hamiltoniana quântica, o comprimento de correlação da cadeia de Heisenberg-Ising é dado pelo inverso do gap,

$$\xi \propto (E_1 - E_0)^{-1} \quad (1.28)$$

entre os níveis do primeiro estado excitado E_1 e do estado fundamental E_0 de \mathcal{H} [16].

Em um sistema de tamanho N , cada spin é influenciado somente pelos spins que estão em sua vizinhança, já que ξ_N é sempre finito. No limite termodinâmico e longe do ponto crítico, ξ_∞ é pequeno, portanto os spins da rede infinita estão também correlacionados somente com seus vizinhos, e então se comportarão da mesma forma como os spins da rede finita. Logo, numa primeira aproximação, o valor por spin de alguma quantidade termodinâmica da rede finita é igual ao seu valor por spin na rede infinita correspondente. Quando o sistema infinito se aproxima da região crítica, o comprimento de correlação ξ_∞ aumenta drasticamente, cada spin se torna correlacionado com outros mais distantes e não mais se comportarão como os spins da rede finita. Exatamente no ponto crítico ξ_∞ diverge e todos os spins estão correlacionados entre si.

O efeito da extensão finita da rede é limitar o comprimento de correlação a um valor máximo possível. Como resultado desta limitação as singularidades de uma transição são arredondadas e a temperatura "crítica" efetiva é deslocada em relação ao valor da rede infinita. Esta temperatura de transição pode ser identificada com a posição do máximo de alguma grandeza termodinâmica do sistema finito. Assim, os efeitos de tamanho aparecem quando ξ_∞ é da ordem das dimensões lineares do sistema finito:

$$\xi_\infty \sim N \quad \Rightarrow \quad \text{efeitos de tamanho} \quad (1.29)$$

Como aspectos gerais há arredondamentos e deslocamentos de singularidades, ou uma mudança na dimensionalidade da transição. A teoria de *finite-size scaling* trata com estes problemas, e propriedades de um sistema no limite termodinâmico, tais como a temperatura de transição e expoentes críticos, podem ser inferidas de cálculos exatos para geometrias finitas [25]. A hipótese básica é que nas vizinhanças da temperatura crítica $T_c(\infty)$, o comportamento de um sistema finito é determinado pela variável escalada $\xi_\infty(T)/N$.

Ao tratar com redes finitas, devemos considerar a questão das condições de contorno. Em cálculos analíticos e computacionais de Hamiltonianos com simetria de translação, é natural usar condições de contorno periódicas, pois elas reduzem consideravelmente a complexidade do problema. Outra razão para se preferir condições periódicas, se deve à eliminação de superfícies e interfaces, explicitando assim os efeitos de tamanho. Também há uma convergência mais rápida das grandezas físicas em direção ao limite termodinâmico.

Longe da região crítica e enquanto $\xi_\infty(T)/N$ for pequeno, esperamos efeitos de tamanho de natureza exponencial nos dados P_N da rede finita com condições periódicas:

$$P_N(T) = P_\infty(T) + O[e^{-\alpha(T)N}] \quad , \quad N \rightarrow \infty \quad , \quad T \text{ fixo} \quad (1.30)$$

Quando $T \rightarrow T_c$, o argumento $\alpha(T)$ da exponencial vai a zero e a expansão (1.30) deixa de ser válida.

No regime crítico a situação é mais sutil, já que os dados P_N comportam-se como:

$$P_N(T) = P_\infty(T) + A_1 N^{-\beta_1} + A_2 N^{-\beta_2} + \dots, \quad N \rightarrow \infty, \quad T = T_c \quad (1.31)$$

onde $\beta_1 < \beta_2$, podendo em alguns casos ter também correcções logarítmicas [22-24,30].

Enquanto formalmente *finite-size scaling* pertence a um limite uniforme, no qual a temperatura aproxima-se da temperatura crítica e o tamanho do sistema assintoticamente tende ao infinito, suas predicções são aplicáveis a sistemas relativamente pequenos; apesar de cuidados adicionais serem necessários quando há suspeitas da presença de singularidades essenciais. A teoria estabeleceu em bases sólidas, a validade de extrair informações acerca do sistema infinito a partir de sua contraparte finita, como assumido pelos métodos de extrapolação direta [57]. Além de sua importância teórica óbvia, efeitos de tamanho estão atualmente, apesar das complicações devidas à gravidade, impurezas e outras inhomogeneidades, dentro da resolução experimental; e testes quantitativos de *finite-size scaling* são esperados em importantes campos como filmes ultra-finos, camadas intercaladas e física de partículas muito pequenas [58].

1.5 - Métodos Numéricos

Resultados analíticos exatos para o limite termodinâmico são

disponíveis para poucos modelos estatísticos [56]. Em sua maioria os modelos são analiticamente intratáveis e grandezas físicas precisam ser determinadas numericamente. Mesmo no caso de modelos analiticamente solúveis, algumas quantidades não são obtidas facilmente e esquemas alternativos são usados. Estes últimos comumente incluem hipóteses, as quais são plausíveis porém não provadas, e investigações numéricas são necessárias para testar sua validade. No caso de cadeias de spin quânticas, três técnicas de solução computacional são geralmente usadas:

a) *Ansatz* de Bethe - Em princípio, as equações de Bethe (1.10) e (1.11) podem ser resolvidas iterativamente para tamanhos N arbitrários, a energia sendo dada por (1.9) e a função de onda por (1.8). De um ponto de vista numérico, há no entanto vários problemas. Primeiro, as equações de Bethe são não-lineares e o número de soluções é desconhecido. Ademais, algumas destas soluções podem corresponder a valores complexos das fases φ , fazendo do cálculo numérico uma tarefa muito difícil. Na prática, o N máximo é limitado pela capacidade de cada computador. Para cadeias de Heisenberg, valores típicos no estado fundamental são $N \sim 2000$ para a energia [24,59] e $N \sim 16$ para as funções de correlação [60]. No último caso, o baixo valor de N é porque a computação das funções de correlação requer o conhecimento explícito das amplitudes $a(m_1, \dots, m_r)$ para todas as configurações possíveis. A soma sobre todas as permutações em (1.8) torna o método extremamente caro em termos de tempo de processamento,

limitando assim o cálculo a pequenos tamanhos.

O *ansatz* de Bethe aplica-se somente a modelos com Hamiltonianos completamente integráveis. Nesta categoria se incluem a cadeia de Heisenberg para $s = 1/2$ e suas generalizações. Na ausência de integrabilidade para $s > 1/2$ muitos esforços foram feitos para se obter modelos semelhantes ao de Heisenberg que fossem solúveis para spin arbitrário. A obtenção por Takhtajan [61] e Babujian [62] de um Hamiltoniano para $s > 1/2$ solúvel pelo *ansatz* de Bethe, deu um grande impulso às pesquisas neste campo. O Hamiltoniano Takhtajan-Babujian tem a forma de uma expansão em potências de $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})$ de grau $2S$. Para $s = 1/2$ ele se reduz, à parte um termo constante, ao antiferromagneto de Heisenberg.

A conjectura feita por Haldane [50], de que cadeias de Heisenberg para spin inteiro tem comportamento diferente daquelas de spin semi-inteiro, trouxe uma grande efervescência aos estudos em magnetismo, devido às dramáticas implicações para a teoria de ondas de spin e outros princípios em mecânica estatística, tal como o de universalidade. Nos modelos de Heisenberg usuais com $s = 1, 3/2, 2, \text{etc.}$, para os quais se aplica a conjectura de Haldane, a ausência de um *ansatz* semelhante ao de Bethe impede a determinação de grandezas termodinâmicas por meio da solução analítica ou numérica de equações análogas as expressões (1.10) e (1.11). Deste modo, métodos de cálculo como Monte Carlo ou Lanczos são essenciais para estudar estes sistemas [63].

b) Monte Carlo - Há diversas técnicas computacionais em mecânica

estatística associadas à geração de números randômicos, as quais são chamadas genericamente de métodos de Monte Carlo [64]. No estudo de sistemas quânticos de muitos corpos, uma particular implementação de Monte Carlo baseada sobre a fórmula de Trotter [65] está se tornando padrão. Sua aplicabilidade é geral e sistemas de tamanhos razoáveis podem ser tratados. Nesta formulação, a função de partição do sistema quântico em d -dimensões é transformada na função de partição de um sistema clássico em $(d+1)$ dimensões; a dimensão adicional no modelo clássico jogando o papel dos efeitos quânticos [66]. Formalmente, esta equivalência só é válida quando o número de Trotter n_t é infinito. No entanto, em altas temperaturas valores moderados de n_t já podem ser considerados praticamente como infinitos. À medida que a temperatura baixa, valores cada vez maiores de n_t são necessários para se atingir a região onde a equivalência é válida. Na investigação de propriedades dos sistemas quânticos em temperaturas muito baixas dois limites são necessários, $n_t \rightarrow \infty$ e $T \rightarrow 0$, o que dificulta a aplicação do método em estudos sobre as características do estado fundamental. O tratamento destes processos limites é extremamente delicado e com frequência leva à introdução de erros numéricos.

Algumas simulações de Monte Carlo em modelos quânticos, têm a vantagem de serem diretamente um cálculo no estado fundamental, de modo que a extrapolação $T \rightarrow 0$ é eliminada. Nestes casos, a precisão da computação é limitada por outros fatores e a aplicação do método fica restrita a modelos específicos. Em cadeias de

Heisenberg com $s = 1/2$, dados para a energia e funções de correlação existem para $N \sim 100$ [67]. O aumento no tamanho dos sistemas introduz muitas complicações computacionais, assim como uma significativa perda de exatidão.

c) Diagonalização Direta - Qualquer Hamiltoniano pode ser diretamente implementado em um computador e resolvido por técnicas-padrão de diagonalização de matrizes [68]. Este método tem o grande trunfo de ser livre de qualquer aproximação, extrapolação ou erro estocástico; e sua precisão é da mesma ordem que a da máquina. O único fator limitante é o tamanho do sistema a ser diagonalizado. Para grandes matrizes, o método de Lanczos [26,27] é comumente usado para a determinação de autovalores e autovetores específicos. Sua exatidão é também da mesma magnitude do erro aritmético da máquina. Dados para a cadeia de Heisenberg com $s = 1/2$, foram obtidos com este método para tamanhos $N \sim 28$ [29-32]. Este tópico é tratado em detalhes no próximo capítulo.

Todas as técnicas de solução numérica discutidas acima, devem ser consideradas mutuamente complementares; as deficiências de umas sendo compensadas pelas qualidades particulares das outras. Resolver modelos por diversos métodos permite um teste mais rico dos próprios métodos e comparações entre seus resultados; contribuindo assim para uma maior compreensão das propriedades dos sistemas físicos.

CAPÍTULO 2

MÉTODOS DE CÁLCULO

No estudo numérico de sistemas finitos dois passos fundamentais são necessários. Primeiro: precisamos de um procedimento para resolver os sistemas de tamanho N . Segundo: precisamos de um algoritmo para extrapolar à N infinito.

A diagonalização exata [68] é o método mais confiável para calcular autovalores, autovetores e demais grandezas de interesse físico. Extrapolações simples ao limite termodinâmico, podem ser feitas por métodos gráficos ou esquemas de ajustes (*fittings*). Entretanto, para uma extrapolação acurada, sofisticadas técnicas numéricas de aceleração de sequências são comumente necessárias.

Começaremos nosso estudo dos métodos de cálculo discutindo a implementação do Hamiltoniano no computador e os pequenos valores impostos ao tamanho das cadeias pela diagonalização direta. Para valores maiores de N usamos o algoritmo de Lanczos [26,27] na obtenção de autovalores e autovetores específicos com grande exatidão numérica. O problema de armazenagem e procura rápidas dos estados quânticos é tratado com a ajuda da técnica de *hashing* [69]. Por fim, discutiremos os métodos de extrapolação numérica e a sua aplicação em *finite-size scaling*.

2.1 - Representação Computacional do Hamiltoniano

A solução no computador da cadeia de Heisenberg-Ising com spin $s = 1/2$ e N sítios, envolve a obtenção de uma representação matricial do Hamiltoniano \mathcal{H} (uma matriz $2^N \times 2^N$) e o uso de algoritmos específicos para a diagonalização de matrizes [68]. Uma

base apropriada para escrever o Hamiltoniano \mathcal{H} , são os autovetores ϕ da componente S_z do spin total (autoestados de Ising). Para esta base, a componente $s_z = \mp 1/2$ dos spins é representada computacionalmente pelos bits 0 e 1, de forma que escrevemos um estado ϕ como um inteiro, já que a combinação de 0 e 1 que denota o estado pode ser considerada um número binário. Tal representação traz a vantagem de se armazenar um estado quântico em uma única palavra, e a conveniência dos operadores quânticos poderem ser implementados por funções lógicas e de manipulação de bits (AND, NEQV, ISHFT, etc.). Como o operador S_z comuta com o Hamiltoniano, os estados são classificados pelo valor de S_z , reduzindo deste modo a matriz \mathcal{H} a $N+1$ blocos de ordem:

$$1, N, \binom{N}{2}, \dots, \binom{N}{N/2}, \dots, \binom{N}{2}, N, 1 \quad (N \text{ par})$$

Em cada um dos blocos a componente S_z é conservada, sendo dada por:

$$S_z = \frac{N}{2} - r \quad (2.1)$$

onde $r = 0, 1, \dots, N/2$ é o número de spins virados em relação ao estado ferromagnético usado como referência.

Para cadeias com condições de contorno periódicas outra redução pode ser obtida através da simetria de invariância translacional. Se $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_t$, são invariantes translacionais, só precisamos selecionar um deles como representativo, usando uma

convenção arbitrária, e conhecer sua multiplicidade. No subespaço com $S_z = 0$, além da simetria de translação temos simetria de inversão temporal, de modo que o número M de representativos K pode ser reduzido à metade. M é aproximadamente dado pelo número de estados do bloco dividido pelo número de termos de cada representativo:

$$M \approx \frac{1}{2N} \binom{N}{\frac{N}{2}} \quad (2.2)$$

Apesar de todas estas reduções, a diagonalização direta através de subrotinas padronizadas (tipo bibliotecas IMSL, NAG, etc.) limita o tamanho das cadeias a $N \sim 12 - 14$, devido aos enormes custos de armazenagem e processamento da matriz \mathcal{X} . Algumas quantidades físicas, como a energia, convergem mais facilmente para pequenos valores de N ; outras no entanto, precisam de valores de N maiores para que extrapolações sejam obtidas sem ambiguidades, o que exige algoritmos que permitam cálculos para cadeias maiores sem que aproximações que reduzam a precisão dos resultados numéricos estejam presentes. Uma das técnicas mais eficientes para a diagonalização exata de grandes matrizes é o método de Lanczos. Esta técnica usa uma base especial na qual uma representação tridiagonal \mathcal{L} de \mathcal{X} é construída passo a passo, de modo que os autovalores extremos de \mathcal{L} (autovalores mais baixos e mais altos do espectro) convergem rapidamente àqueles autovalores correspondentes de \mathcal{X} , mesmo quando as dimensões de \mathcal{L} são muito menores que as dimensões de \mathcal{X} .

2.2 - Método de Lanczos

Em 1950 Lanczos [26] propôs um método de redução de matrizes simétricas à forma tridiagonal, e o aplicou a operadores diferenciais e integrais, mostrando empiricamente que o problema de encontrar alguns autovalores e autovetores dos extremos do espectro destes operadores poderia ser resolvido muito acuradamente diagonalizando pequenas matrizes. Para uma dada matriz simétrica real X de ordem $(n \times n)$ e um dado vetor unitário $|v_1\rangle$, este algoritmo produz em n passos uma base ortonormal $V = (|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle)$ e uma matriz tridiagonal Z (matriz de Lanczos) tal que:

$$XV = VZ \quad (2.3)$$

Todo autovalor de Z é também um autovalor de X , de forma que o espectro completo de X pode ser encontrado a partir da mais facilmente manejável matriz Z .

O primeiro passo é operar com X sobre o vetor unitário $|v_1\rangle$ para gerar um outro vetor $|v_2\rangle$ também unitário e ortogonal a $|v_1\rangle$. Um novo vetor unitário $|v_3\rangle$, ortogonal a $|v_1\rangle$ e a $|v_2\rangle$, é gerado pela ação de X sobre $|v_2\rangle$, e assim sucessivamente até que o espaço completo de vetores mutuamente independentes tenha sido gerado. Vale frisar que cada um destes vetores têm a dimensão da matriz original X . Estas operações são descritas pelo conjunto de equações abaixo:

$$|u_2\rangle = \mathcal{X}|v_1\rangle \quad (2.4)$$

$$a_1 = \langle v_1 | u_2 \rangle \quad (2.5)$$

e para $j = 2, 3, 4, \dots$,

$$|w_j\rangle = |u_j\rangle - a_{j-1}|v_{j-1}\rangle \quad (2.6)$$

$$y_j = (\langle w_j | w_j \rangle)^{1/2} \quad (2.7)$$

$$|v_j\rangle = |w_j\rangle / y_j \quad (2.8)$$

$$|u_{j+1}\rangle = \mathcal{X}|v_j\rangle \quad (2.9)$$

$$b_j = \langle v_{j-1} | u_{j+1} \rangle \quad (2.10)$$

$$a_j = \langle v_j | u_{j+1} \rangle \quad (2.11)$$

Assim, na base dos $|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle$ a matriz \mathcal{X} terá a forma:

$$\mathcal{X} = \begin{bmatrix} a_1 & & & & \\ b_2 & a_2 & & & \\ & b_3 & a_3 & & \\ & & b_4 & a_4 & \\ & & & \dots & \dots \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

O aspecto mais atraente do algoritmo é que alguns dos autovalores extremos de \mathcal{X}_ℓ (a parte $\ell \times \ell$ da matriz \mathcal{X}), são excelentes aproximações a alguns dos autovalores extremos de \mathcal{X} mesmo quando $\ell \ll n$. Limites de erro e alguns resultados teóricos sobre a razão de convergência para os autovalores computados em cada passo j foram dados por Kaniel [70]. Estes limites mostraram

que autovalores bem isolados perto dos extremos do espectro poderiam ser encontrados depois de um pequeno número de passos (20 ou 30) independentemente da ordem da matriz X . Uma convergência rápida também ocorre para autovalores bem separados do centro do espectro ou que estejam bem representados no vetor inicial $|v_1\rangle$; no entanto, se o autovalor desejado estiver nos extremos do espectro, porém pouco separado do resto do espectro, sua convergência será lenta. Aproximações acuradas aos correspondentes autovetores também podem ser calculadas. Neste caso é necessário reter na memória ou em algum dispositivo auxiliar, os vetores $|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle$. A convergência pode ser monitorada numericamente diagonalizando a matriz tridiagonal X depois de cada passo e observando a variação dos autovalores ou autovetores.

Em (2.6) cada vetor gerado é ortogonalizado pelo método de Schmidt ao vetor precedente. Assim, se $|v_{j-1}\rangle$ é ortogonal a $|v_{j-2}\rangle$ então $|v_j\rangle$ será teoricamente ortogonal a ambos os vetores $|v_{j-1}\rangle$ e $|v_{j-2}\rangle$. No entanto, em cálculos computacionais erros de arredondamento nas operações aritméticas básicas levam à perda de ortogonalidade dos vetores $|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle$, fazendo com que as quantidades computadas pelo algoritmo diverjam fortemente dos seus valores na aritmética exata. Este comportamento prático levou Lanczos a sugerir uma reortogonalização completa. Para cada iteração, o novo vetor $|v_j\rangle$ seria ortogonalizado com relação a todos os prévios vetores $|v_1\rangle, \dots, |v_{j-1}\rangle$ gerados, e não mais apenas em relação ao seu precedente, implicando assim em uma maior demanda em termos de memória e de tempo de processamento. Uma

que autovalores bem isolados perto dos extremos do espectro poderiam ser encontrados depois de um pequeno número de passos (20 ou 30) independentemente da ordem da matriz X . Uma convergência rápida também ocorre para autovalores bem separados do centro do espectro ou que estejam bem representados no vetor inicial $|v_1\rangle$; no entanto, se o autovalor desejado estiver nos extremos do espectro, porém pouco separado do resto do espectro, sua convergência será lenta. Aproximações acuradas aos correspondentes autovetores também podem ser calculadas. Neste caso é necessário reter na memória ou em algum dispositivo auxiliar, os vetores $|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle$. A convergência pode ser monitorada numericamente diagonalizando a matriz tridiagonal Z depois de cada passo e observando a variação dos autovalores ou autovetores.

Em (2.6) cada vetor gerado é ortogonalizado pelo método de Schmidt ao vetor precedente. Assim, se $|v_{j-1}\rangle$ é ortogonal a $|v_{j-2}\rangle$ então $|v_j\rangle$ será teoricamente ortogonal a ambos os vetores $|v_{j-1}\rangle$ e $|v_{j-2}\rangle$. No entanto, em cálculos computacionais erros de arredondamento nas operações aritméticas básicas levam à perda de ortogonalidade dos vetores $|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle$, fazendo com que as quantidades computadas pelo algoritmo divirjam fortemente dos seus valores na aritmética exata. Este comportamento prático levou Lanczos a sugerir uma reortogonalização completa. Para cada iteração, o novo vetor $|v_j\rangle$ seria ortogonalizado com relação a todos os prévios vetores $|v_1\rangle, \dots, |v_{j-1}\rangle$ gerados, e não mais apenas em relação ao seu precedente; implicando assim em uma maior demanda em termos de memória e de tempo de processamento. Uma

análise numérica detalhada do método de Lanczos foi realizada por Paige [27]. O mesmo também elaborou uma particular implementação que otimiza a aplicação da técnica.

O algoritmo de Paige é uma variante computacional do algoritmo de Lanczos que não usa reortogonalização. Mesmo em face da perda total de ortogonalidade, é possível obter autovalores acurados usando o método de forma iterativa. Isto se deve ao fato de que a perda de ortogonalidade e a convergência parcial dos autovalores de \mathcal{X} caminham lado a lado e que apesar da ortogonalidade global ser perdida, uma ortogonalidade local dos vetores de Lanczos persiste enquanto os elementos b_j fora da diagonal de \mathcal{X} não forem tão pequenos. Paige mostrou que os autovalores de \mathcal{X}_j necessariamente convergem quando j aumenta e que diferem dos autovalores de \mathcal{X} por quantidades que dependem da precisão da máquina. O algoritmo é descrito pelas equações:

$$|u_2\rangle = \mathcal{X}|v_1\rangle \quad (2.13)$$

$$a_1 = \langle v_1 | u_2 \rangle \quad (2.14)$$

e para $j = 2, 3, 4, \dots$,

$$|w_j\rangle = |u_j\rangle - a_{j-1}|v_{j-1}\rangle \quad (2.15)$$

$$b_j = (\langle w_j | w_j \rangle)^{1/2} \quad (2.16)$$

$$|v_j\rangle = |w_j\rangle / b_j \quad (2.17)$$

$$|u_{j+1}\rangle = \mathcal{X}|v_j\rangle - b_j|v_{j-1}\rangle \quad (2.18)$$

$$a_j = \langle v_j | u_{j+1} \rangle \quad (2.19)$$

Este algoritmo é computacionalmente mais eficiente que o algoritmo de Lanczos convencional. Erros de arredondamento são minimizados e boa convergência é obtida mesmo para autovalores muito próximos. Além disto, necessita de menos memória. De fato, somente dois vetores ao longo do processo de iteração precisam ser armazenados; $|u_j\rangle$ e $|v_{j-1}\rangle$ são necessários em (2.13) e (2.14), $|w_j\rangle$ pode sobrepor-se a $|u_j\rangle$ em (2.15) e $|v_j\rangle$ pode sobrepor-se a $|w_j\rangle$ em (2.17), finalmente $|u_{j+1}\rangle$ pode sobrepor-se a $|v_{j-1}\rangle$ em (2.18). Depois de cada iteração a matriz \mathcal{L} pode ser diagonalizada e um bom critério para encerrar o processo é a convergência dos autovalores mais baixos de \mathcal{L} .

O método de Lanczos aparece então como uma poderosa ferramenta para calcular o estado fundamental de Hamiltonianos com grandes dimensões, com a imensa vantagem de não ser preciso uma diagonalização direta da matriz completa. Sendo em sua natureza iterativo, o método pode ser eficientemente implementado em computadores de porte médio com um consumo de tempo de processamento dentro de valores razoáveis. A convergência é acelerada se o estado tentativa $|v_1\rangle$, que inicializa o processo de Lanczos, contém todas as simetrias da solução. Por convenientes escolhas do estado inicial, podemos explorar diferentes regiões do espectro, e conseqüentemente o método não se limita apenas a determinação do estado fundamental [71].

Refinamentos da técnica original de Lanczos vêm sendo amplamente usada em vários ramos da física, tais como cálculos em modelos de camadas na física nuclear [72], determinação da

densidade de estados em matéria condensada [73], solução de modelos em teoria de campo [74]; além de outras importantes aplicações em diversas áreas da computação científica [75].

2.3 - Técnica de Hashing

Um dos mais sérios problemas para a solução numérica do Hamiltoniano é o problema da armazenagem e da procura dos estados quânticos. Uma maneira simples de resolvê-lo é numa primeira etapa gerarmos todos os representativos e armazená-los sequencialmente em um vetor $J(i)$, com $1 \leq i \leq M$; e numa segunda etapa quando um dado representativo K for gerado pela ação dos operadores quânticos durante o processo de iteração, procurá-lo no vetor $J(i)$ começando em $i = 1$. Naturalmente esta forma não é a mais apropriada, porque o número de testes cresce linearmente com M .

A técnica de *hashing* [69] é um excelente método para tratar questões de armazenagem e de procura de números inteiros em uma tabela. A idéia principal da técnica é que nós podemos construir uma função $i = h(K)$ (função de *hash*) que dá uma correspondência entre os representativos (K) e uma posição i no vetor de armazenamento J . Assim, a posição ocupada por K em J não é ao acaso, o próprio valor de K de algum modo determina sua posição em J . Se a correspondência for um a um, o problema da armazenagem é resolvido facilmente porque quando um estado for gerado, nós somente precisamos avaliar $h(K)$ e armazená-lo na posição i , o mesmo ocorrendo com a busca dos representativos em etapas

posteriores. No entanto, é praticamente impossível construir uma tal função biunívoca; em geral ocorre que diferentes representativos K_1, K_2, \dots , têm o mesmo índice i , isto é, $h(K_1) = h(K_2), \dots$. Neste caso dizemos que há colisão e precisamos de um algoritmo que trate com este problema e de uma função de *hash* que minimize o número de colisões.

Foi mostrado [69] que a função,

$$h(K) = \text{MOD}(K, M) + 1 \quad (2.20)$$

trabalha muito bem na prática. Aqui, MOD é a função módulo: resto da divisão do primeiro argumento pelo segundo. Para lidar com o problema das colisões precisamos de um novo vetor $L(i)$ de dimensão M . Este vetor atua como uma espécie de memória das colisões ocorridas em $J(i)$ e por convenção se a posição i em J estiver vazia então $L(i) = -1$. Nós também necessitamos de uma variável auxiliar R para ajudar na busca de lugares vazios em J . Inicialmente, quando o vetor J está completamente vazio, temos $R = M+1$.

Suponhamos que um estado ϕ_i tenha sido gerado e queremos armazenar o seu representativo K . Os seguintes passos são necessários:

H1) Avaliamos o índice de posição i correspondente ao representativo K por meio da função de *hash* (2.20).

H2) Se $L(i) = -1$ a posição i em J está vazia e podemos armazenar o

representativo K como indicado no passo H6. Se $L(i) \neq -1$ a posição $J(i)$ está ocupada e devemos continuar com o algoritmo até encontrarmos um lugar apropriado em J para armazenarmos K .

H3) Se $J(i) = K$ então na posição i o inteiro K já tinha sido armazenado em um passo anterior (durante o processo K já havia aparecido devido a um outro estado ϕ_t , de quem ele também é representativo) e o algoritmo termina com sucesso. Se $J(i) \neq K$ continuamos a busca.

H4) Se $L(i) \neq \emptyset$, então fazemos $i = L(i)$ e voltamos ao passo H3, ou seja, continuamos a procura usando a posição indicada em $L(i)$. Se $L(i) = \emptyset$, o representativo K não havia aparecido previamente e devemos encontrar um lugar vazio na tabela $J(i)$ como indicado em H5.

H5) Diminuimos R por uma unidade. Se $L(R) = -1$ a posição R em J está vazia e então armazenamos K . Se $L(R) \neq -1$ diminuimos R mais uma vez por uma unidade até encontrarmos um lugar vazio em J (se R chega ao valor \emptyset , a tabela J está completamente ocupada e devemos recomeçar todo o processo com um M maior). Então fazemos $L(i) = R$, redefinimos i como $i = R$ e vamos ao passo H6.

H6) Marcamos a posição i do vetor L como um lugar ocupado e guardamos o representativo K em J ; com $L(i) = \emptyset$ e $J(i) = K$, respectivamente.

Depois de montadas as tabelas L e J , cada vez que um dado K aparecer numa etapa posterior do processo de iteração poderemos

localizá-lo facilmente através dos passos H1, H3 e H4. Esta técnica é da ordem de 10 vezes mais econômica em termos de tempo de processamento do que o processo simples de busca descrito anteriormente.

2.4 - Algoritmos de Extrapolação

Numerosos métodos de matemática aplicada são métodos iterativos: um problema proposto é resolvido gerando uma sequência de números S_0, S_1, \dots, S_n ; a solução exata, S , do problema é o limite desta sequência quando n vai ao infinito e cada número da sequência (S_n) é uma aproximação ao limite S ,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} S_n = S \quad (2.21)$$

No entanto, nenhum processo computacional pode ser levado indefinidamente e em qualquer aplicação prática a sequência (S_n) deve ser terminada artificialmente depois de ter sido calculado algum elemento S_n . A diferença entre S_n e S é o erro, e_n , do n -ésimo ponto de iteração:

$$e_n = S_n - S \quad (2.22)$$

O modo como a sequência (S_n) converge a S , ou equivalentemente, como o erro e_n tende a zero, é dado pelo limite da razão entre dois erros consecutivos,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e_n + 1}{e_n} = \rho \quad (2.23)$$

Se $\rho = 1$ a convergência é logarítmica, se $0 < \rho < 1$ a convergência é linear e se $\rho = 0$ a convergência é de alta ordem [76,77].

Em numerosos casos a sequência (S_n) converge "lentamente" e é importante "acelerar" sua convergência. O método de aceleração da convergência consiste em transformar a sequência (S_n) em uma outra sequência (T_n) que convirja ao limite S mais rápido que a sequência original (S_n) , ou seja,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} T_n = \lim_{n \rightarrow \infty} S_n = S \quad (2.24)$$

com a condição que T_n acelera S_n expressa por,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{T_n - S}{S_n - S} = 0 \quad (2.25)$$

Como exemplo, seja uma sequência (S_n) da forma:

$$S_n \equiv S(h) \equiv S + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \alpha_3 h^6 + \dots, \quad h = 1/n \quad (2.26)$$

Definindo uma nova sequência (T_n) por:

$$T_n \equiv T(h) \equiv [4S(h) - S(2h)]/3 \quad (2.27)$$

teremos:

$$T(h) = S - 4\pi_2 h^4 - 20\pi_3 h^6 + \dots \quad (2.28)$$

Assim, os termos em h^2 foram eliminados e os erros em $T(h)$ são somente $O(h^4)$.

Há vários algoritmos para acelerar a convergência, cada um deles trabalhando melhor em certas classes específicas de sequências. Apesar da grande quantidade de estudos, numerosas questões permanecem abertas, principalmente aquelas concernentes a teoremas que garantam a existência da convergência do algoritmo e a sua capacidade de aceleração. Muito das conclusões acerca da eficiência destes algoritmos estão baseadas mais em evidências empíricas obtidas por testes numéricos, do que em provas rigorosas que existem apenas para casos particulares [76-79]. Surge então o problema de escolher qual método é o mais apropriado, quando pouco é conhecido acerca dos termos da sequência ou de seu eventual comportamento, sendo a distinção entre convergência linear e logarítmica das mais importantes na seleção entre os diversos métodos.

Em *finite-size scaling* a análise de dados numéricos de redes finitas de tamanho N , é essencialmente um problema de extrapolar uma sequência finita de valores P_N de uma grandeza física para estimar seu valor na rede infinita,

$$P_\infty = \lim_{N \rightarrow \infty} P_N \quad (2.29)$$

Um dos mais conhecidos e simples esquemas de extrapolação é a lei de escala $N^{-\beta}$ [57]. Geralmente leis de escala, quando existem, não são tão simples assim e esquemas numéricos sofisticados devem ser usados se resultados acurados são desejados. Foi mostrado que métodos de transformação de seqüências são uma ferramenta poderosa para a realização de extrapolações a redes infinitas [80].

Dada uma seqüência de valores $(P_n) \equiv P_N$, a qual converge ao limite $P_\infty = \lim_{n \rightarrow \infty} P_n$, uma tabela triangular de aproximantes a P_∞ pode ser gerada aplicando uma sucessão de transformações não lineares. Denotando esta tabela por $P(n,m)$ teremos:

$$\begin{array}{cccc}
 P(0,0) & & & \\
 P(1,0) & P(1,1) & & \\
 P(2,0) & P(2,1) & P(2,2) & \\
 P(3,0) & P(3,1) & & \\
 P(4,0) & & & \\
 \vdots & & &
 \end{array} \quad (2.30)$$

onde a primeira coluna é formada pela seqüência original (P_n) e espera-se que cada nova coluna convirja mais rapidamente que a sua predecessora.

Longe da região crítica, dados de redes finitas com condições de contorno periódicas aproximam-se ao seu limite exponencialmente rápido,

$$P_N = P_\infty + O(e^{-\alpha N}), \quad N \rightarrow \infty \quad (2.31)$$

com um comportamento típico de uma convergência linear [76,77]. Sequências deste tipo podem ser convenientemente aceleradas por uma variedade de algoritmos, dos quais o mais simples é a transformação de Shanks [81]. Cada elemento da tabela (2.30) é formado a partir de seus três elementos predecessores adjacentes:

$$P_n^{(m+1)} = (P_{n-1}^{(m)} P_{n+1}^{(m)} - [P_n^{(m)}]^2) / (P_{n-1}^{(m)} + P_{n+1}^{(m)} - 2P_n^{(m)}) \quad (2.32)$$

Se os elementos da sequência original estão exatamente em progressão geométrica,

$$P_n^{(0)} \cong P_N = P_\infty + cq^N, \quad c, q \neq 0 \quad (2.33)$$

os teoremas de convergência e de aceleração do algoritmo [77] garantem que uma única aplicação da transformação (2.32) a qualquer três elementos consecutivos elimina o "transiente" cq^N e dá o limite correto:

$$P_n^{(1)} = P_\infty \quad (2.34)$$

Se a sequência $(P_n^{(0)})$ não é da forma (2.33), mesmo assim $P_n^{(1)}$ aproxima-se do valor P_∞ mais rápido que $P_n^{(0)}$, de maneira que sucessivas reaplicações da equação (2.32) acelera a convergência.

Nas vizinhanças da região crítica ou no próprio ponto crítico, a situação é mais delicada já que em geral os valores das quantidades físicas de redes finitas aproximam-se ao seu limite

é importante que os "N" em P_N sejam consecutivos; por exemplo, uma sequência semelhante a (2,5,3,...) ou (3,6,8,...) não deve ser considerada, enquanto uma sequência do tipo (2,4,6,8,...) pode ser usada. Esta família de transformações engloba alguns casos especiais. Para $\delta = 0$ ela é equivalente ao algoritmo iterativo de Shanks [81] e com $\delta = 1$ ao algoritmo ϵ de Wynn para gerar os aproximantes à tabela de Padé [83]. Por escolhas apropriadas do parâmetro δ , Vanden Broeck e Schwartz foram capazes de acelerar a convergência de uma grande variedade de sequências, apesar de pouca justificativa matemática a estes sucessos ter sido dada: não era claro qual valor de δ deveria ser escolhido para otimizar a aceleração de qualquer classe particular de sequências.

Tal como a transformação de Shanks, o algoritmo VBS é exato para sequências em progressão geométrica do tipo (2.33), no sentido que $P_n^{(1)} = P_\infty$, sendo portanto muito útil na aceleração de sequências convergindo linearmente do tipo (2.31). Para sequências com convergência logarítmica semelhantes a (2.35), Barber e Hamer [84] mostraram analiticamente que se o parâmetro δ é escolhido com o valor $\delta = -1$, então,

$$P_n^{(2)} = P_\infty + O(N^{-\beta'}) \quad (2.39)$$

onde β' é o mínimo de β_2 e β_1+2 . Futuras acelerações podem ser obtidas reaplicando as transformações (2.36) e (2.37) a $P_n^{(2)}$. Ao fazer isto, o parâmetro δ a ser usado em $Q_n^{(2)}$ deve ser zerado para compensar efeitos vindos de $Q_n^{(1)}$. Então, as sucessivas

transformações são geradas pelas relações:

$$Q_n^{(m)} = \delta_m Q_n^{(m-1)} + 1/[P_{n+1}^{(m)} - P_n^{(m)}] \quad (2.40)$$

$$P_n^{(m+1)} = P_n^{(m)} + 1/[Q_n^{(m)} - Q_{n-1}^{(m)}] \quad (2.41)$$

onde,

$$\delta_m = - [1 - (-1)^m]/2 \quad (2.42)$$

Várias aplicações deste algoritmo ao estudo de modelos em mecânica estatística mostraram excelentes resultados [80]. Outros algoritmos alternativos para extrapolação de sequências de redes finitas tem sido também desenvolvidos e testados com sucesso [85]. Para uma aplicação eficiente do algoritmo VBS, são necessários pelo menos cinco termos na sequência de dados originais. Os termos devem ter uma precisão razoável (seis dígitos decimais no mínimo), para evitar problemas advindos dos erros de arredondamento. Estes critérios precisam ser levados em consideração nos cálculos com sistemas finitos.

CAPÍTULO 3

LEIS DE ESCALA NA REGIÃO ANISOTRÓPICA

A cadeia de Heisenberg-Ising com spin $s = 1/2$, apesar de ser exatamente solúvel pelo *ansatz* de Bethe [17], vem sendo muito estudada por métodos numéricos [86], devido principalmente ao caráter intrincado da solução exata.

Neste capítulo, apresentamos resultados numéricos exatos para a energia do estado fundamental e para o gap de massa, da cadeia de Heisenberg XXZ em toda região de anisotropia axial. Nosso cálculo foi baseado no método de Lanczos [26,27], sendo $N = 28$ o maior tamanho computado. Extrapolações dos dados mostram que o estado fundamental na cadeia infinita é duplamente degenerado. Uma dependência exponencial do gap de massa com o tamanho é obtida, mas correções de lei de potência tornam-se cada vez mais importantes à medida que nos afastamos da região de alta anisotropia [29,31,32]. Este tipo de dependência do gap de massa com o tamanho foi sugerido por de Vega e Woynarovich [21] usando predicções analíticas do *ansatz* de Bethe. Nosso cálculo é a primeira computação feita para testar a predição acima.

3.1 - Autovalores e Efeitos de Tamanho

A energia do estado fundamental e do primeiro estado excitado do Hamiltoniano de Heisenberg-Ising,

$$\mathcal{H} = J \sum_m \left\{ S_x(m)S_x(m+1) + \alpha \left[S_x(m)S_x(m+1) + S_y(m)S_y(m+1) \right] \right\} \quad (3.1)$$

com condições de contorno periódicas, foram computadas como função

do tamanho para valores pares de N , em toda região $0 < \alpha \leq 1$. Em (3.1), a constante de troca J é positiva, e $S_x(m)$, $S_y(m)$, e $S_z(m)$ são os operadores de spin para $s = 1/2$ no sítio m . Para evitar frustração na condição de contorno, somente valores pares de N foram computados. Evidentemente, no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), a magnitude das quantidades físicas independem da paridade de N , apesar da convergência para N ímpares ser em geral mais lenta do que para N pares [57,87].

A teoria prediz que na região anisotrópica ($0 \leq \alpha < 1$), o estado fundamental do sistema infinito é um duplete separado do espectro de excitações por um gap de energia [41,42,88] e o sistema tem ordem de longo alcance a temperatura nula [44]. A natureza deste estado no regime de forte anisotropia é basicamente do tipo Néel, porém as flutuações quânticas induzidas pela parte transversa do Hamiltoniano reduzem a magnetização à medida que o parâmetro α cresce [14]. No ponto de Heisenberg ($\alpha = 1$) e na fase XY ($\alpha > 1$) não há gap, e o estado fundamental torna-se um singlete [41,42,88] sem ordem de longo alcance, mas com correlações que decaem lentamente [44,48]. Este quadro, o qual emergiu de um esforço combinado de soluções analíticas e numéricas, foi questionado por Betsuyaku [89], ao propor a existência de uma nova fase com um estado fundamental singlete e ordem de longo alcance, entre o limite de Ising e o regime XY, em torno de $\alpha = 0.49$. Suas conclusões foram baseadas em cálculos numéricos para o calor específico e o gap de soliton. No entanto, os métodos usados por Betsuyaku para analisar os dados numéricos foram objeto de crítica

[90]. Nossos resultados não mostram evidências de tal fase.

Um passo fundamental em nossa computação é a diagonalização completa do Hamiltoniano. Este método não inclui aproximações ou erros estocásticos, porém sua aplicação é restrita a pequenas cadeias. Para grandes matrizes, o algoritmo de Lanczos [26,27] aparece como uma técnica eficiente, cujo aspecto mais atrativo é que os autovalores mais baixos e os correspondentes autovetores são obtidos iterativamente e com uma precisão da mesma ordem que a precisão numérica do computador.

O estado fundamental e o primeiro estado excitado do Hamiltoniano (3.1) estão contidos no subespaço de S_z total igual a zero. Levando também em conta simetrias de translação e de inversão temporal, uma substancial redução de memória é obtida, já que somente um estado representativo de um conjunto de invariantes é armazenado para computação. Apesar destas reduções, a dimensão do Hamiltoniano cresce rapidamente com N , como mostrado na tabela 3.1. No que se refere a tempo de processamento, a procura e o armazenamento rápidos dos estados é tratada eficientemente via a técnica de *hashing* [69]. Estas considerações permitiram estender resultados numéricos exatos para o gap de massa na região anisotrópica obtidos com $N = 16$ spins [91] para tamanhos maiores, até $N = 28$. Os dados da nossa computação foram obtidos usando *standard Fortran double precision*, com um critério de convergência de 10^{-14} para a energia. Listagens completas para as energias por spin do estado fundamental e do primeiro estado excitado são apresentadas no apêndice 1.

N	2^N	M
4	16	2
6	64	3
8	256	7
10	1024	15
12	4096	44
14	16384	128
16	65536	415
18	262144	1367
20	1048576	4654
22	4194304	16080
24	16777216	56450
26	67108864	200170
28	268435456	716728
30	1073741824	2585850

Tabela 3.1 - Algumas dimensões relacionadas à cadeia de Heisenberg-Ising com spin $s = 1/2$. N indica o tamanho do sistema, 2^N o número total de configurações e M o número de invariantes obtidos por operações de simetrias de translação e de inversão temporal no subespaço de $S_z = 0$.

3.2 - Lei de Escala para o Gap de Massa

Na tabela 3.2 mostramos a energia do estado fundamental em função do tamanho N para alguns valores do parâmetro de anisotropia α . O resultado analítico de Orbach-Walker para a cadeia infinita [37,38] é também mostrado para comparações. Na região próxima ao limite de Ising, a convergência dos dados numéricos é extremamente rápida, de modo que mesmo para tamanhos relativamente pequenos, já obtemos o valor da energia no limite termodinâmico. À medida que nos aproximamos do ponto isotrópico, a convergência torna-se cada vez mais lenta, e os efeitos de tamanho ficam mais evidentes. De acordo com a teoria de *finite-size scaling* [25], isto ocorre quando o comprimento de correlação ξ_∞ do sistema infinito é da mesma magnitude do tamanho do sistema finito. Assim, a análise dos dados numéricos por si só sugere um crescimento sistemático de $\xi_\infty(\alpha)$ quando nos movemos em direção ao regime isotrópico, e uma possível divergência em $\xi_\infty(\alpha)$ no limite de Heisenberg (ponto crítico). Esta conjectura é corroborada pela figura 1.2, onde o gap de massa do sistema infinito é plotado em função de α . O comprimento de correlação $\xi_\infty(\alpha)$ na região de Heisenberg-Ising é inversamente proporcional a este gap.

Extrapolações das energias computadas ao limite termodinâmico foram feitas usando o algoritmo VBS [82]. Uma ilustração do processo de extrapolação é apresentado no apêndice 2 para a energia do estado fundamental $E_N^{(0)}(\alpha)$, com $\alpha = 0.95$. Uma concordância excelente é encontrada com o resultado analítico de

$-E_N^{(0)}(\alpha)$				
N	$\alpha=0.1$	$\alpha=0.4$	$\alpha=0.7$	$\alpha=1.0$
4	0.25490	0.31375	0.40226	0.50000
6	0.25274	0.29717	0.37637	0.46713
8	0.25252	0.29228	0.36794	0.45639
10	0.25250	0.29033	0.36416	0.45154
12	0.25249	0.28944	0.36214	0.44895
14	0.25249	0.28898	0.36093	0.44740
16	0.25249	0.28874	0.36016	0.44639
18	0.25249	0.28860	0.35963	0.44571
20	0.25249	0.28852	0.35926	0.44522
22	0.25249	0.28848	0.35899	0.44486
24	0.25249	0.28845	0.35878	0.44458
26	0.25249	0.28843	0.35862	0.44437
28	0.25249	0.28842	0.35849	0.44420
∞	0.25249	0.28840	0.35778	0.44315

Tabela 3.2 - Energia exata do estado fundamental $E_N^{(0)}(\alpha)$ por spin, comparada com o resultado analítico para a cadeia infinita [37,38]. Na região de pequenos valores da anisotropia α , os dados para o sistema finito convergem rapidamente ao limite $N \rightarrow \infty$. Efeitos de tamanho se tornam evidentes nas proximidades do ponto isotrópico, sugerindo uma divergência do comprimento de correlação $\xi_\infty(\alpha)$ em $\alpha = 1.0$. Energias são expressas em unidades de J.

Orbach-Walker para $E_N^{(0)}(\alpha)$ em toda região $0 < \alpha \leq 1$, como pode ser visto na tabela 3.3. O gap de massa $G_N(\alpha) = N[E_N^{(1)}(\alpha) - E_N^{(0)}(\alpha)]$ que aparece no espectro da computação, é devido ao tamanho finito da cadeia e está portanto ligado ao fato de que sistemas finitos não têm quebra espontânea de simetria [42]. Aumentando o comprimento da cadeia a separação entre os níveis diminui, e dentro da precisão numérica das nossas extrapolações o gap vai a zero, sugerindo que o estado fundamental é duplamente degenerado para $N \rightarrow \infty$. Um teste mais sensível da estrutura do espectro é obtida examinando como o gap escala com o tamanho. Se o gap fecha-se exponencialmente com N , o estado fundamental do sistema infinito é duplamente degenerado, enquanto uma dependência $G_N \sim 1/N$ é característica de um espectro quase-contínuo [57,92]. Este comportamento pode ser visualizado graficando o chamado gap de massa escalado NG_N . Um decaimento de NG_N a zero significa um estado degenerado, enquanto um limite finito e não nulo do gap escalado é próprio de um estado singleto.

Nossos resultados para o gap de massa escalado são mostrados na figura 3.1, plotando NG_N em função do inverso do tamanho, para vários valores do parâmetro α . Um decaimento rápido com $1/N$ é encontrado na região de forte anisotropia. Isto é consistente com o fato de que o estado fundamental da cadeia do tipo Ising infinita é um duplete. Por outro lado, no ponto de Heisenberg, o gap de massa escalado converge logaritmicamente [22-24,30] ao valor $\pi^2/2$ [42]: neste caso o estado fundamental é um singleto no limite de N infinito. Para pequenos tamanhos não é óbvio que NG_N

α	$-E^{(0)}$ <i>extrap.</i>	$-E^{(1)}$ <i>extrap.</i>	$-E^{(0)} = -E^{(1)}$ <i>anal.</i>
0.05	0.2506246	0.2506246	0.2506246
0.10	0.2524938	0.2524938	0.2524938
0.15	0.2555934	0.2555934	0.2555934
0.20	0.2599000	0.2599000	0.2599000
0.25	0.2653809	0.2653809	0.2653809
0.30	0.2719940	0.2719940	0.2719940
0.35	0.2796880	0.2796880	0.2796880
0.40	0.2884029	0.2884028	0.2884028
0.45	0.2980694	0.2980694	0.2980694
0.50	0.3086111	0.3086110	0.3086110
0.55	0.3199440	0.3199438	0.3199438
0.60	0.3319796	0.3319783	0.3319783
0.65	0.3446259	0.3446215	0.3446212
0.70	0.3577828	0.3577791	0.3577787
0.75	0.3713566	0.3713601	0.3713597
0.80	0.3852780	0.3852802	0.3852803
0.85	0.3994679	0.3994685	0.3994688
0.90	0.4138684	0.4138684	0.4138684
0.95	0.4284378	0.4284378	0.4284378

Tabela 3.3 - Valores extrapolados das energias do estado fundamental $E^{(0)}$ e do primeiro estado excitado $E^{(1)}$, comparados com o resultado analítico para a cadeia infinita [37,38,41]. Extrapolações são difíceis para valores do parâmetro de anisotropia α em torno de $\alpha = 0.70$.

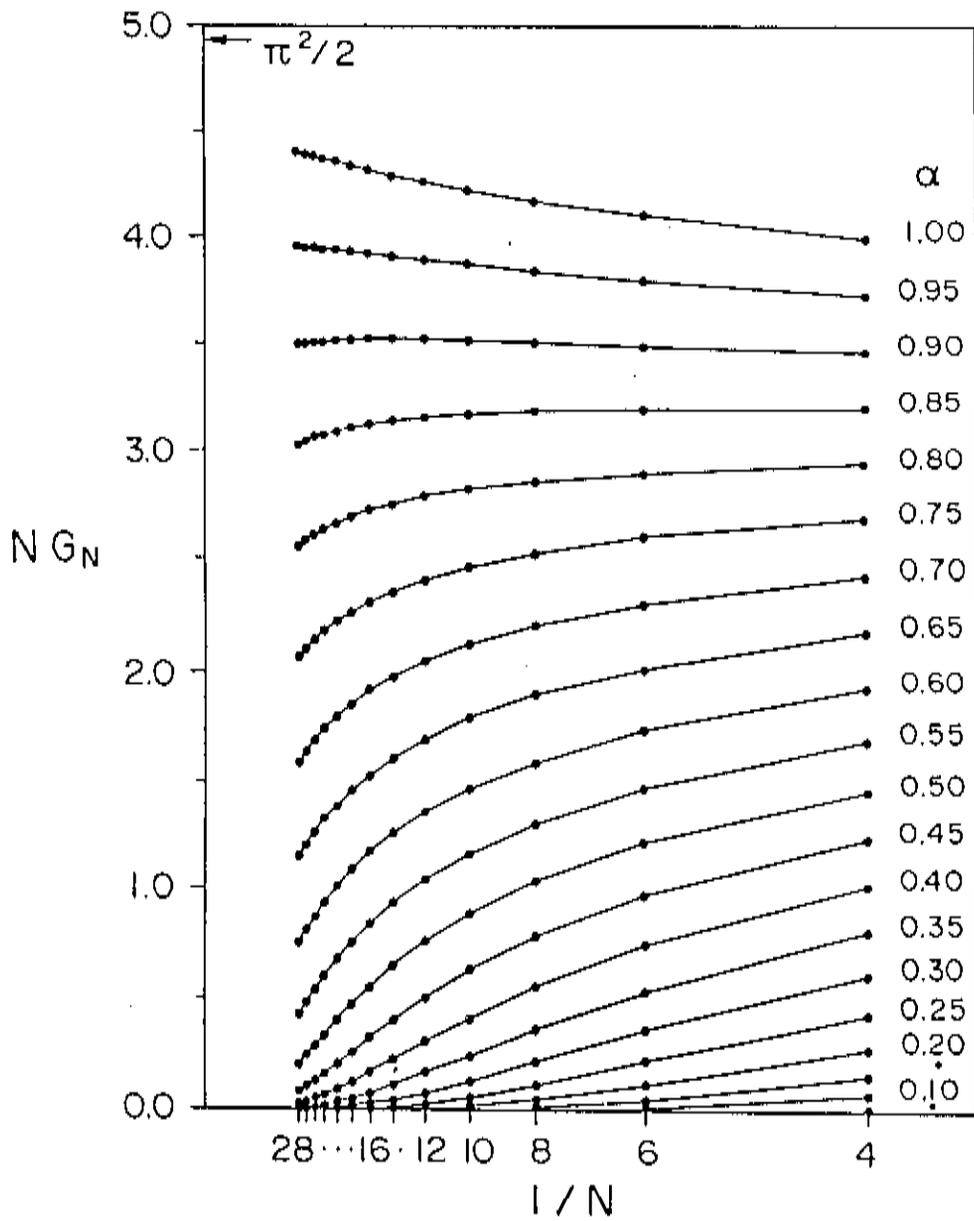


Figura 3.1 - Gap de massa escalado NG_N em função do inverso do tamanho para vários valores da anisotropia α . Para pequenos α um decaimento rápido com $1/N$ é encontrado, sugerindo um limite nulo. Em $\alpha = 1$, NG_N converge logaritmicamente ao valor $\pi^2/2$ (Ref. 22-24,30,42). Linhas contínuas são desenhadas para guiar os olhos. Os valores plotados são $1/N$, onde N está indicado na escala.

vai a zero em toda a região anisotrópica, e uma análise grosseira poderia prever a existência de um valor crítico de α separando os dois regimes. No entanto, à medida que aumentamos o tamanho da cadeia, o aparente α_c crítico se desloca para valores maiores, em direção a $\alpha = 1$. Este fato é ilustrado na figura 3.2, onde dados de NG_N são apresentados para uma divisão fina de α nas proximidades do ponto isotrópico. Nós conjecturamos, que quão próximos estejamos de $\alpha = 1$, o tamanho necessário para que ocorra a mudança de um comportamento de NG_N crescente para decrescente, se torne cada vez maior. Para testar esta hipótese, adotamos um procedimento que assume explicitamente uma lei de escala.

Cálculos de *finite-size scaling* para cadeias de Ising quânticas [93], mostram que o gap de massa fecha-se exponencialmente com o tamanho. Estimativas assintóticas obtidas por de Vega e Woyrnarovich [21], baseadas sobre o *ansatz* de Bethe, também sugerem um comportamento exponencial para o gap de massa da cadeia de Heisenberg XXZ com anisotropia axial. Ademais, seus cálculos revelam que a dependência exponencial é modificada por correções de lei de potência, as quais tornam-se mais importantes nas proximidades da região de Heisenberg, como podemos ver na fórmula abaixo:

$$G_N(\alpha) = \frac{2\sqrt{8k^2}}{\pi^{3/2}} K(k) \operatorname{senhy} \frac{k_1^{N/2}}{N^{1/2}} \left[1 + \frac{3}{4N} \frac{1+k_1^2}{1-k_1^2} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right] \quad (3.2)$$

onde o módulo elítico k é definido pelas raízes da equação:

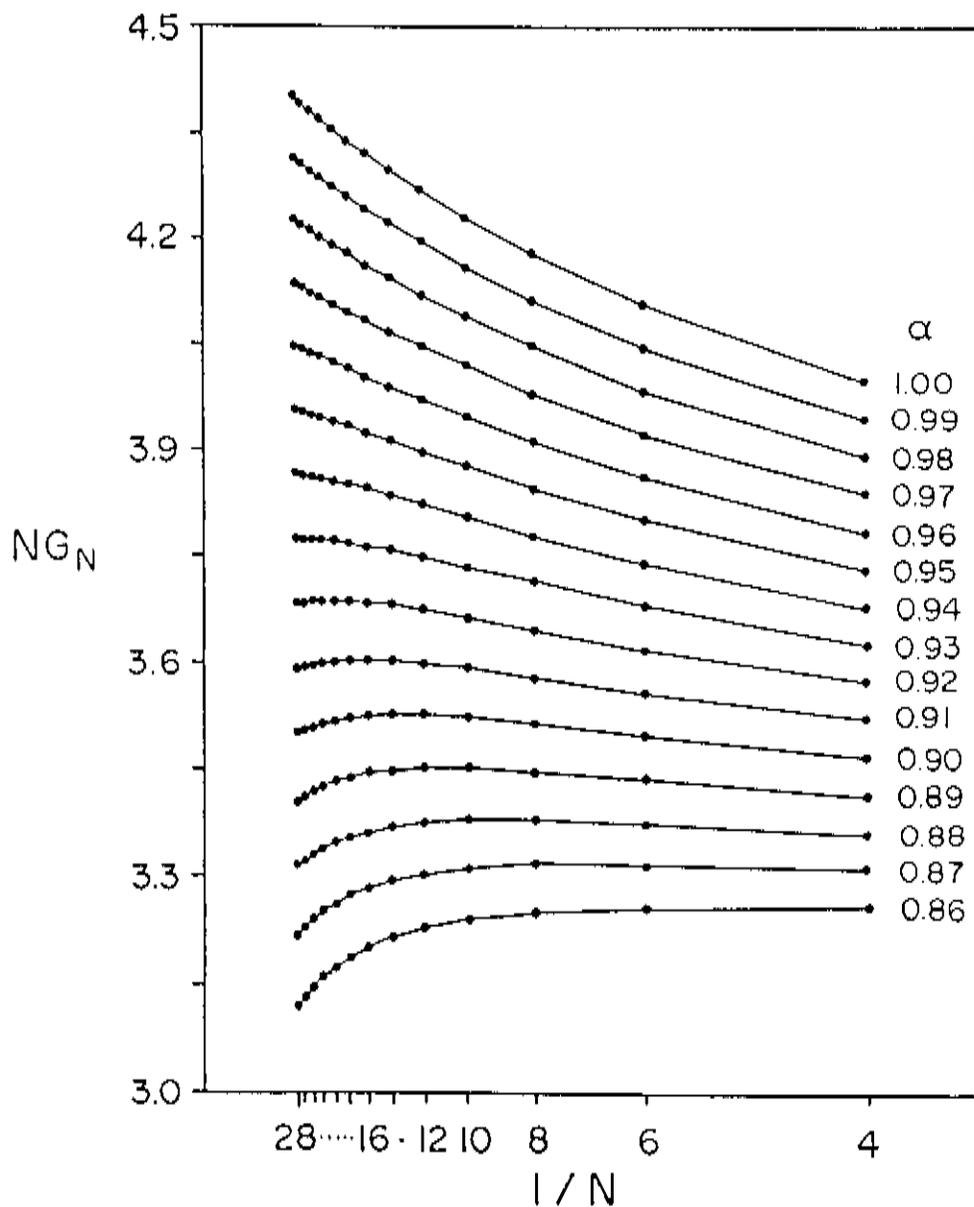


Figura 3.2 - Gap de massa escalado em função do inverso do tamanho para uma divisão fina de α , nas vizinhanças do limite isotrópico. Dois comportamentos podem ser distinguidos: NG_N crescente e decrescente. A análise para tamanhos sucessivos mostra que o α_c crítico, separando ambos os regimes, torna-se maior quando a cadeia cresce, apontando para um $\alpha_c = 1$.

$$\frac{\gamma}{\pi} = \frac{K'(k)}{K(k)} \quad (3.3)$$

com,

$$\operatorname{sech} \gamma = \alpha \quad (3.4)$$

$$\sqrt{k_1} = (1-k')/k \quad (3.5)$$

$$k' = \sqrt{1-k^2} \quad (3.6)$$

Vale salientar que uma expressão semelhante à (3.2) é também encontrada para a energia do estado fundamental [21]. Como hipótese, assumimos uma dependência assintótica do gap de massa com o tamanho da forma:

$$G_N = A N^{-\beta} \exp(-\sigma N) \quad (3.7)$$

onde o coeficiente σ é dependente de α , $\sigma = \sigma(\alpha)$, e A é uma constante arbitrária. A lei de escala dada por (3.7) inclui de uma maneira mista, correções exponencial e de potência. Como usual em cálculos de sistemas finitos [25,93], nós escrevemos:

$$\ln G(N) = \ln A - \beta \ln N - \sigma N \quad (3.8)$$

$$\ln G(N-2) = \ln A - \beta \ln(N-2) - \sigma(N-2) \quad (3.9)$$

assim,

$$\ln \left[\frac{G(N)}{G(N-2)} \right] = \beta \ln \left[\frac{N-2}{N} \right] - 2\sigma \quad (3.10)$$

Definindo quantidades dependentes do tamanho por:

$$X(N) \equiv \ln \left[1 - \frac{2}{N} \right] \quad (3.11)$$

$$Y(N) \equiv \ln \left[\frac{G(N)}{G(N-2)} \right] \quad (3.12)$$

nós geramos as sequências numéricas:

$$\beta(N) = \frac{Y(N) - Y(N-2)}{X(N) - X(N-2)} \quad (3.13)$$

$$\sigma(N) = \frac{1}{2} \left[\beta(N)X(N) - Y(N) \right] \quad (3.14)$$

as quais convergem respectivamente a β e a σ no limite assintótico $N \rightarrow \infty$. Como é evidente das expressões (3.13) e (3.14), um elemento de $\beta(N)$ e $\sigma(N)$ é calculado usando a informação correspondente a três tamanhos sucessivos.

Extrapolações das sequências $\sigma(N, \alpha)$ ao limite termodinâmico foram feitas pelo algoritmo VBS. Resultados são mostrados na figura 3.3, onde os dados $\sigma(\alpha)$ da computação são comparados com a predição teórica de de Vega e Woyrnarovich [21]. Devemos notar que o coeficiente σ está relacionado ao coeficiente k_1 da fórmula (3.2) através da seguinte equação:

$$\sigma = - \frac{\ln k_1}{2} \quad (3.15)$$

Para pequenos valores do parâmetro α , há uma forte

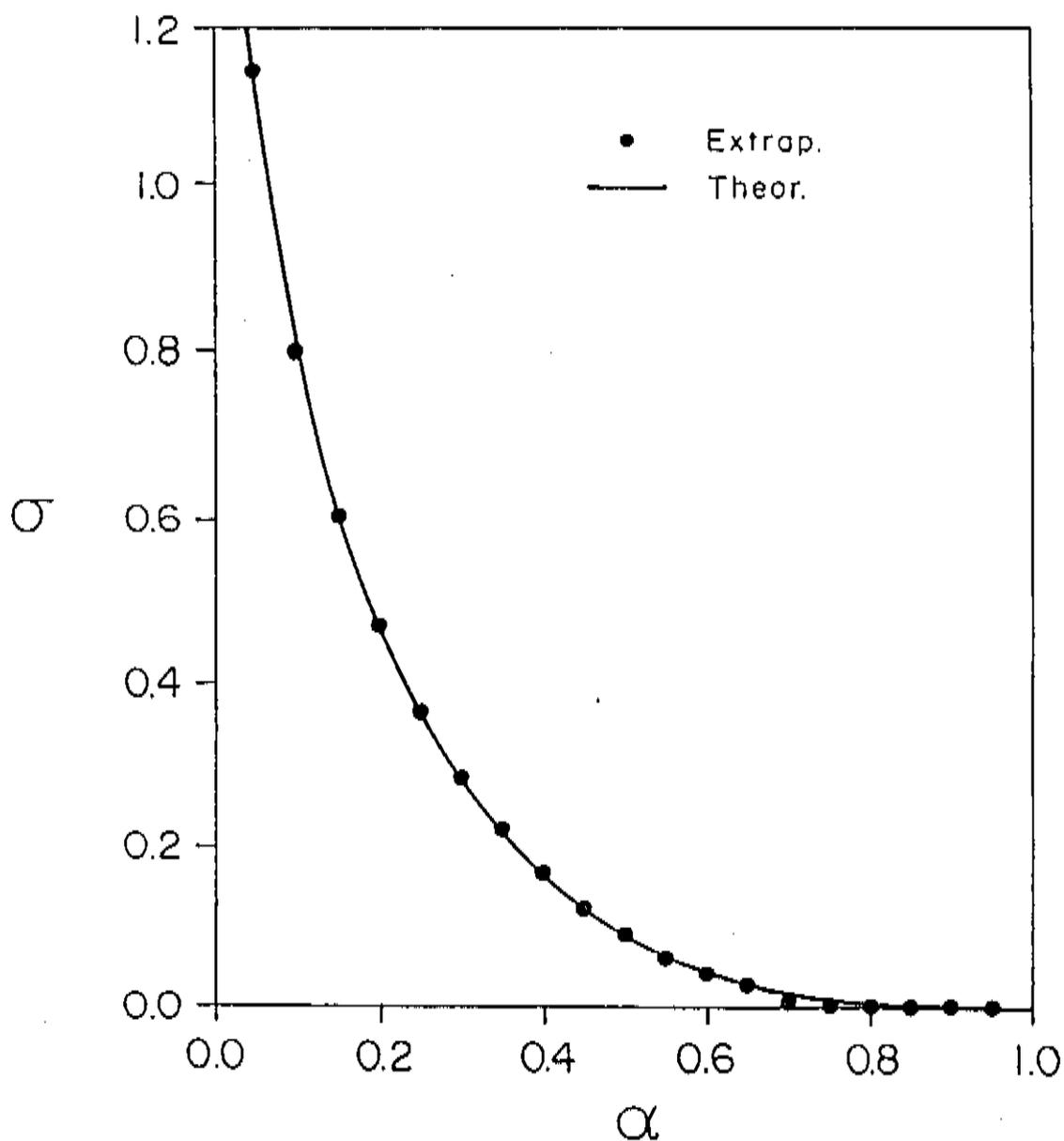


Figura 3.3 - Coeficiente $\sigma(\alpha)$ da dependência exponencial do gap de massa em função de α . Pontos referem-se à nossa extrapolação e a linha contínua a predição teórica da Ref. 21. Forte comportamento exponencial para α pequeno exige uma computação extremamente precisa para tamanhos grandes (o gap é da mesma ordem dos erros numéricos). Extrapolações para $\alpha = 0.05$ e $\alpha = 0.10$ foram feitas considerando $N = 20$ e 24 como o tamanho máximo, respectivamente.

dependência exponencial, de modo que uma computação extremamente precisa é necessária para se obter uma resolução entre os níveis, particularmente quando se trata de grandes cadeias. Neste caso, o gap torna-se da mesma ordem dos erros numéricos. Diferentemente, para α próximo ao ponto isotrópico e pequenos σ , grandes tamanhos são necessários para se resolver o comportamento exponencial das correções de lei de potência. Todavia, nossos resultados extrapolados estão em excelente concordância com as previsões analíticas de de Vega e Woynarovich, indicando que o gap fecha-se exponencialmente em toda região anisotrópica, e portanto o estado fundamental é duplamente degenerado.

Um fato interessante obtido de nosso cálculo, é a existência de um cruzamento (*crossover*) das correções de tamanho de $\sigma(\alpha)$ como função da anisotropia α . Isto é ilustrado na figura 3.4, onde o $\sigma(\alpha)$ analítico para N assintoticamente grande é graficado juntamente com os resultados da computação para alguns tamanhos particulares. Para $\alpha < 0.7$, $\sigma(N, \alpha)$ aproxima-se ao limite assintótico por baixo do valor analítico de $\sigma(\alpha)$; enquanto o contrário acontece para $\alpha > 0.8$. Extrapolações são difíceis na região do cruzamento em torno de $\alpha = 0.7$. Este cruzamento dos efeitos de tamanho está relacionado a um cruzamento equivalente nas correções de lei de potência em função de α .

A fórmula analítica (3.2) indica duas correções principais do tipo lei de potência ao comportamento exponencial dominante, com expoentes $1/2$ e $3/2$, mas com coeficientes que são dependentes de α . Perto do limite de Ising, o coeficiente da potência $N^{-3/2}$ é

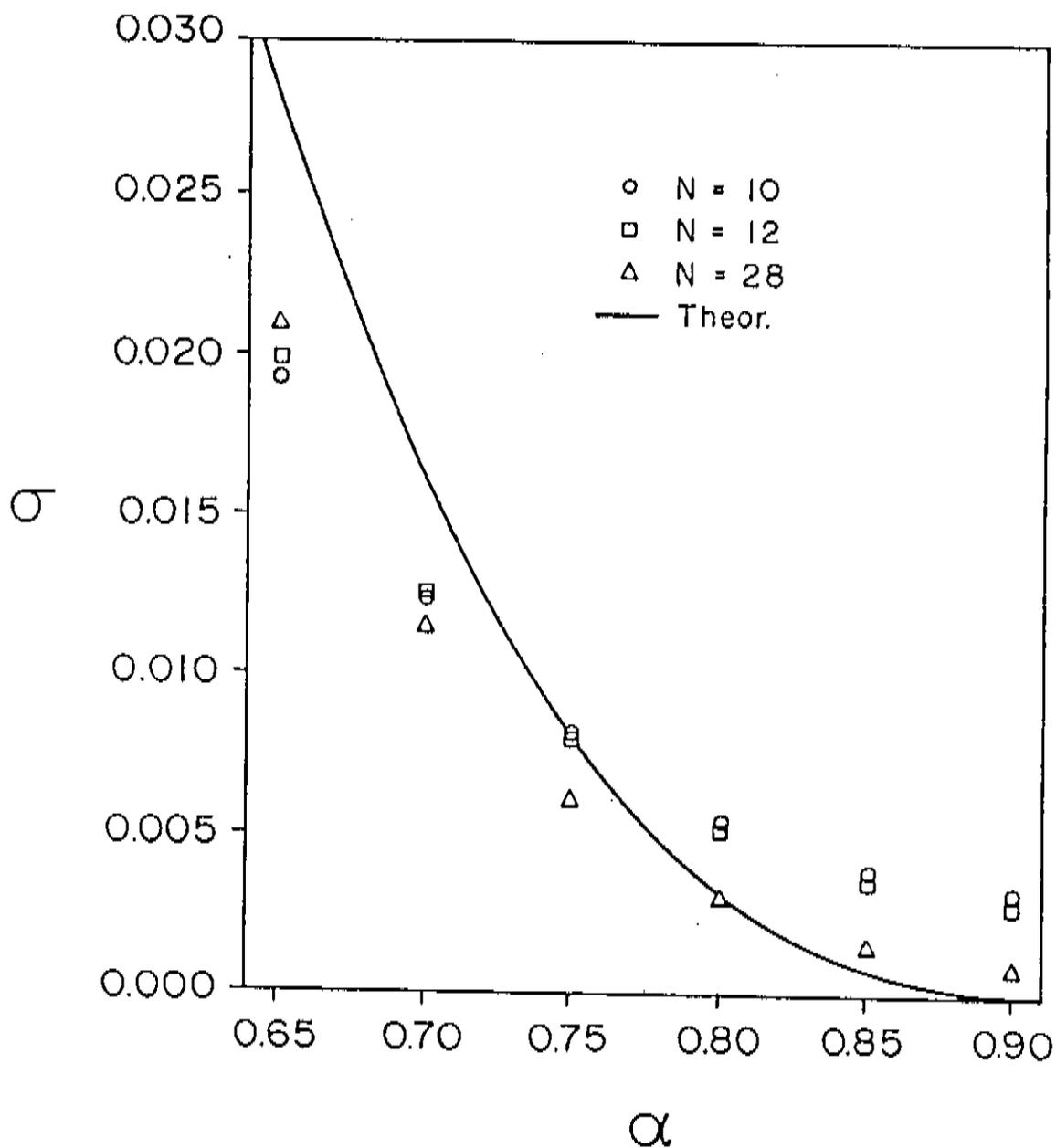


Figura 3.4 - Coeficiente $\sigma(N, \alpha)$ plotado para alguns tamanhos particulares em função da anisotropia α . A linha contínua mostra a predição teórica da Ref. 21. Um cruzamento na direcção dos efeitos de tamanho ocorre em torno do valor $\alpha = 0.7$.

muito pequeno, levando a um expoente líquido da ordem de $1/2$. Por outro lado, quando α se aproxima do limite isotrópico, este coeficiente cresce e torna-se extraordinariamente grande para α muito perto de $\alpha = 1$, resultando em complicadas correções com termos de potências combinados e dependentes do tamanho da cadeia. Em nosso cálculo, um expoente β efetivo é obtido em função de α , como mostrado na figura 3.5 para diferentes N . Um cruzamento dependente do tamanho de um $\beta \sim 1/2$ (região de Ising) para um $\beta \sim 1$ (região de Heisenberg) ocorre em torno de $\alpha = 0.7$. Estas estimativas de β estão dentro dos limites predito pela teoria, no entanto problemas numéricos de convergência e fortes efeitos de tamanho tornam extremamente difíceis as extrapolações, de modo que resultados obtidos para β via o algoritmo VBS são imprecisos.

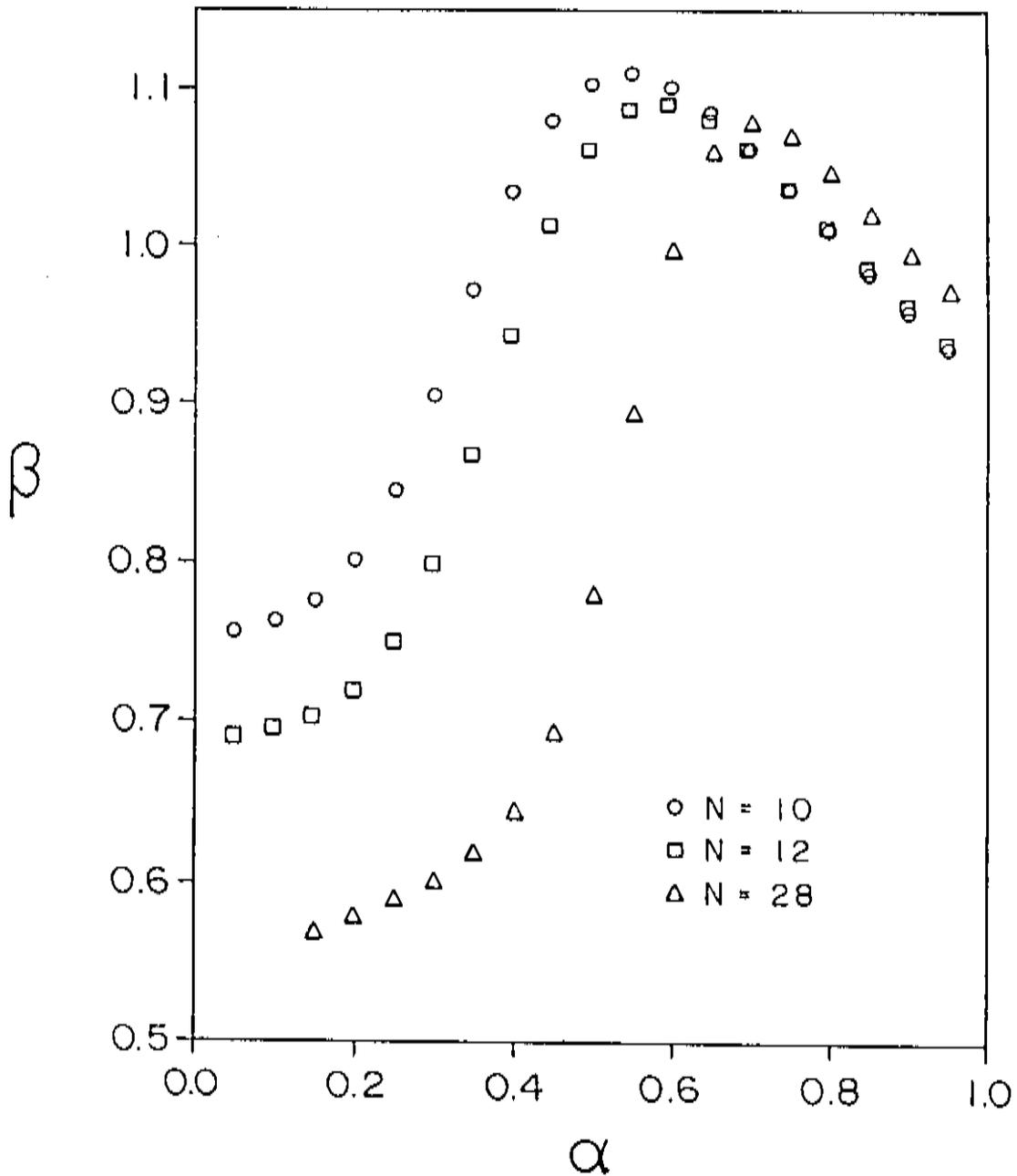


Figura 3.5 - Expoente $\beta(N, \alpha)$ da correção de potência ao gap de massa para alguns tamanhos particulares em função da anisotropia α . Os pontos $\alpha = 0.05$ e $\alpha = 0.10$ não foram calculados para $N = 28$, como explicado na legenda da figura 3.3. No limite de Ising (α pequeno), a tendência com N aponta para um $\beta \sim 1/2$. Um cruzamento para um $\beta \sim 1$ ocorre em torno de $\alpha = 0.7$. Problemas numéricos e fortes efeitos de tamanho fazem imprecisas as extrapolações de β .

CAPÍTULO 4

LEIS DE ESCALA NO PONTO ISOTRÓPICO

Em toda a região crítica do modelo de Heisenberg XXZ com spin $s = 1/2$, leis de escala no limite assintótico de grandes cadeias, podem ser obtidas usando argumentos do *ansatz* de Bethe [22]. Neste regime, o Hamiltoniano é invariante frente às transformações do grupo conforme, de modo que correções de tamanho têm um caráter universal e podem ser alternativamente determinadas através da invariância conforme [23,24]. No ponto de Heisenberg (caso isotrópico) ambos os métodos acima produzem uma dependência com o tamanho do tipo lei de potência, mas com correções logarítmicas. Este comportamento logarítmico tem uma convergência extremamente lenta, e métodos numéricos de *finite-size scaling* parecem, em uma primeira análise do problema, inadequados para extrapolações ao limite termodinâmico [92,94].

Face ao cenário descrito acima, veremos que correções logarítmicas podem ser avaliadas para quantidades físicas importantes, as quais incluem a energia do estado fundamental, o gap de massa e a velocidade da onda de spin [30]. A última grandeza é a mais interessante, pois os dados computados mostram um crescimento monotônico com o tamanho que vai além do resultado analítico para a cadeia infinita [39]. Uma mudança do comportamento da tendência da velocidade da onda de spin com o tamanho, de modo a produzir o limite correto, é esperado bem acima dos tamanhos disponíveis em nosso cálculo numérico. Este tipo de efeito e sua correspondente lei de escala, não tem sido discutido na literatura, apesar de sua importância se estender a modelos com $s > 1/2$ [95]. Através de aproximações analíticas e do tratamento

apropriado dos dados numéricos, nós fazemos predições para o valor deste tamanho característico.

4.1 - Determinação Numérica da Velocidade da Onda de Spin

Usando os métodos descritos nos capítulos anteriores, determinamos as energias do estado fundamental $E_N^{(0)}$ e do primeiro estado excitado $E_N^{(1)}$ da cadeia isotrópica, diagonalizando exatamente o Hamiltoniano com a técnica de Lanczos [26,27] até tamanhos $N = 28$ spins.

A velocidade V da onda de spin, definida como a inclinação inicial da curva de dispersão energia-momento, pode ser avaliada usando o fato de que para uma relação de dispersão do tipo seno [39], temos:

$$V \sim \frac{N[E^{(p)} - E^{(0)}]}{p} \quad (4.1)$$

onde $E^{(0)}$ é a energia por spin do estado fundamental e $E^{(p)}$ é a menor energia de um estado com momento $p \rightarrow 0$. Em uma rede finita com condições de contorno periódicas, o menor momento p diferente de zero é:

$$p = 2\pi/N \quad (4.2)$$

Numericamente, podemos calcular V fazendo o limite $N \rightarrow \infty$ de:

$$V_N = \frac{N^2 [E_N^{(P)} - E_N^{(0)}]}{2\pi} \quad (4.3)$$

Devido a dificuldades de implementação computacional, nós usamos o método de Lanczos para determinar $E_N^{(P)}$ sem especificar a simetria completa do estado, limitando assim o nosso cálculo a um tamanho máximo de $N = 22$ para este caso.

4.2 - Correções Logarítmicas aos Autovalores

Na tabela 4.1 mostramos os valores numéricos para a energia do estado fundamental $E_N^{(0)}$, gap de massa escalado $G'_N = NG_N$ e velocidade da onda de spin V_N , obtidos pelo processo de Lanczos com uma precisão de convergência da ordem de 10^{-14} . Valores extrapolados usando o algoritmo VBS [82] são também mostrados, juntamente com os resultados analíticos exatos para a cadeia infinita. É importante mencionar que o valor extrapolado para a energia do estado fundamental coincide com o valor analítico dentro de uma precisão de sete casas decimais. As outras quantidades, devido às fortes correções logarítmicas, extrapolam a valores os quais diferem aproximadamente 5% dos resultados exatos. Assim, um procedimento diferente deve ser adotado para avaliar o comportamento no limite de $N \rightarrow \infty$.

Ajustes (*fittings*) usando o método dos mínimos quadrados [96] foram feitos para as correções logarítmicas como função do tamanho. Algumas destas leis de escala foram sugeridas por

N	$-E_N^{(0)}$	G'_N	V_N
4	0.5000000	4.0000000	1.2732395
6	0.4671293	4.1084496	1.4534024
8	0.4563867	4.1813952	1.5181537
10	0.4515446	4.2323900	1.5472512
12	0.4489492	4.2701616	1.5622955
14	0.4473964	4.2994756	1.5708298
16	0.4463935	4.3230208	1.5759878
18	0.4457083	4.3425072	1.5792519
20	0.4452193	4.3589200	1.5813779
22	0.4448582	4.3729884	1.5827966
24	0.4445839	4.3852608	-
26	0.4443707	4.3960956	-
28	0.4442017	4.4057664	-
Ext.	0.4431472	4.7453764	1.5855828
Ana.	0.4431472	4.9348022	1.5707963

Tabela 4.1 - Valores exatos para a energia do estado fundamental por spin $E_N^{(0)}$, gap de massa escalado $G'_N = N^2[E_N^{(1)} - E_N^{(0)}]$ e velocidade da onda de spin $V_N = N^2[E_N^{(p)} - E_N^{(0)}]/2\pi$, para vários tamanhos N. Nossas extrapolações são comparadas com resultados analíticos para a cadeia isotrópica infinita: $E_\infty^{(0)} = -\ln 2 + 1/4$ (Ref. 20), $G'_\infty = \pi^2/2$ (Ref. 42) e $V_\infty = \pi/2$ (Ref. 39). Energias são expressas em unidades de J.

soluções do *ansatz* de Bethe [22] e por argumentos da invariância conforme [23,24]. Chamamos a atenção para o fato de que as teorias acima diferem ligeiramente em suas predições para os termos de alta ordem. Cálculos do *ansatz* de Bethe resultam em correções à energia do estado fundamental da forma:

$$E_N^{(0)} - E_\infty = -\frac{\pi^2}{12N^2} \left\{ 1 + \frac{0.3433}{(\ln N)^3} + O\left[\frac{\ln(\ln N)}{(\ln N)^4}\right] + O\left[\frac{1}{(\ln N)^4}\right] \right\} \quad (4.4)$$

Enquanto as correções ao gap de massa são dadas pela expressão:

$$E_N^{(1)} - E_N^{(0)} = \frac{\pi^2}{2N^2} \left\{ 1 - \frac{1}{2(\ln N)} + O\left[\frac{\ln(\ln N)}{(\ln N)^2}\right] + O\left[\frac{1}{(\ln N)^2}\right] \right\} \quad (4.5)$$

Vale salientar que nos resultados obtidos através da invariância conforme não aparecem os termos $O[\ln(\ln N)/(\ln N)^4]$ e $O[\ln(\ln N)/(\ln N)^2]$ das equações (4.4) e (4.5), respectivamente [23]. Ademais, em vez do coeficiente 0.3433 encontrado em (4.4) se tem o coeficiente 3/8 [24].

Os nossos melhores ajustes foram obtidos para as seguintes expressões:

$$-12N^2 (E_N^{(0)} - E_\infty) / \pi^2 = 1 + a_1 (\ln N)^{-3} + a_2 (\ln N)^{-4} \quad (4.6)$$

$$2N^2 (E_N^{(1)} - E_N^{(0)}) / \pi^2 = 1 + b_1 (\ln N)^{-1} + b_2 (\ln N)^{-2} \quad (4.7)$$

$$N^2 (E_N^{(p)} - E_N^{(0)}) / \pi^2 = 1 + c_1 (\ln N)^{-2} + c_2 (\ln N)^{-3} \quad (4.8)$$

Tal como nas fórmulas anteriores, E_{∞} é o valor de Hulthén para a energia do estado fundamental por spin do sistema infinito, $E_N^{(0)}$ é a energia do estado fundamental da cadeia finita de tamanho N , $E_N^{(1)}$ é a energia para o primeiro estado excitado, e $E_N^{(p)}$ é a menor energia para estados de momento $p = 2\pi/N$. A forma funcional para as correções de tamanho em (4.6) e (4.7) são as mesmas de Cardy [23]. A diferença entre as energias na expressão (4.8) determina a velocidade da onda de spin no limite de N grande (ver eq. 4.3). Não há derivação analítica das correções logarítmicas de (4.8) comunicadas na literatura.

Os coeficientes que otimizam os ajustes das expressões (4.6), (4.7) e (4.8) são mostrados na tabela 4.2. Devemos notar que as equações analíticas (4.4) e (4.5) só são válidas, rigorosamente falando, no limite assintótico de grandes N , enquanto os nossos ajustes são obtidos para tamanhos razoavelmente pequenos, o que explica a ligeira discrepância entre os coeficientes dos ajustes e os coeficientes analíticos.

Valores extrapolados a partir das equações de ajustes para tamanhos até $N = 256$ e resultados exatos da nossa computação são plotados na figura 4.1. O aspecto mais notável é a dependência com o tamanho da quantidade dada por (4.8), relacionada ao comportamento da velocidade da onda de spin. Um máximo aparece para tamanhos da ordem de $N_M = 54$, mas devido à correção logarítmica lenta, um platô se desenvolve em uma ampla região de tamanhos N , como pode ser visto no inserto da figura. Este N_M marca o começo do regime, também de convergência lenta, de valores

	1	2
a	0.10951	0.32164
b	-0.42340	0.22073
c	0.50570	-1.34040

Tabela 4.2 - Coeficientes que otimizam os ajustes por mínimos quadrados das fórmulas (4.6)-(4.8).

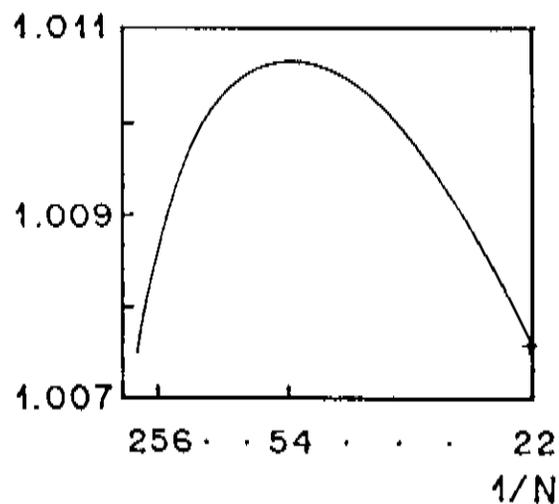
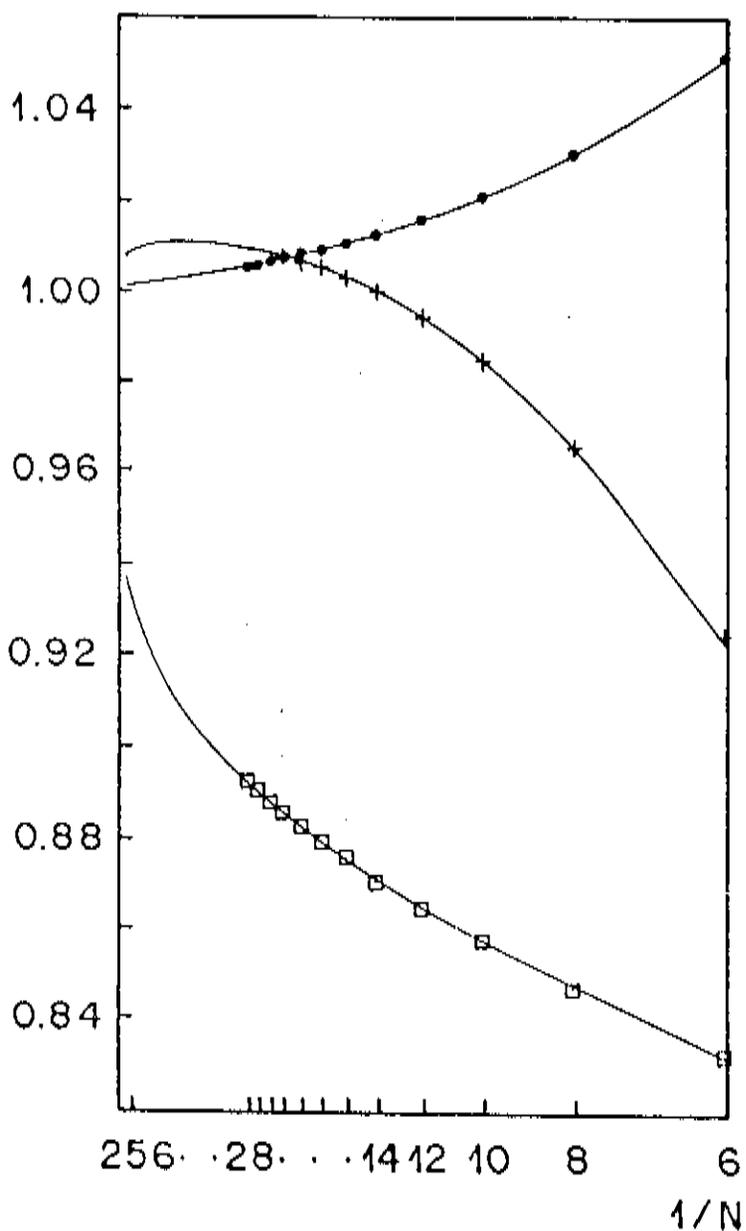


Figura 4.1 - Correções de tamanho na cadeia isotrópica. Pontos referem-se a valores exatos para as correções da energia do estado fundamental, quadrados ao gap de massa escalado e cruces a velocidade da onda de spin; normalizadas em relação aos seus comportamentos assintóticos (valem 1 em $N \rightarrow \infty$). Linhas contínuas indicam os nossos ajustes. No inserto, em uma escala diferente, o comportamento da velocidade da onda de spin próximo ao máximo.

decrecentes em direção ao limite termodinâmico. Nós cremos que este tamanho predito para o máximo de (4.8) é uma boa aproximação, já que nossos ajustes tem uma precisão até tamanhos $N \sim 200$. Esta conclusão vem de comparações com valores da energia do estado fundamental e do gap de massa, calculados para alguns tamanhos N isolados via o *ansatz* de Bethe [59]. Para comprimentos muito grandes da cadeia, nossos ajustes desviam-se do comportamento assintótico devido à contribuição dos dados com tamanhos pequenos.

Para a energia do estado fundamental, a lei de escala com correção proporcional a $(\ln N)^{-2}$, produz excelente convergência mesmo para tamanhos pequenos. Isto ilustra um caso típico onde algoritmos de extrapolação usuais, como o VBS, funcionam adequadamente (ver tabela 4.1). Por outro lado, o termo de correção $(\ln N)^{-1}$ ao gap de massa escalado faz extremamente difícil qualquer extrapolação baseada sobre valores obtidos com somente cadeias pequenas. Este comportamento contrasta com aquele observado na região tipo Ising do modelo XXZ (ver Cap. 3) onde uma dependência exponencial dominante com o tamanho para o gap de massa é encontrada.

CAPÍTULO 5

ESTRUTURA DO ESTADO FUNDAMENTAL E FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO

Em um sistema antiferromagnético quântico unidimensional com simetria contínua, o estado fundamental não possui ordem de longo alcance, mesmo a temperatura nula, devido às fortes flutuações quânticas de ponto zero. No entanto, se a simetria do sistema é discreta, um estado fundamental ordenado poderá ocorrer a $T = 0$ [3]. Um exemplo típico deste comportamento é a cadeia de Heisenberg-Ising. Na região anisotrópica (simetria discreta), o estado fundamental é duplamente degenerado e apresenta ordem de longo alcance. Todavia, flutuações quânticas estão presentes, levando a uma redução da magnetização espontânea, de modo que no ponto isotrópico (simetria contínua) o estado fundamental é um singlete sem ordem de longo alcance [41,44,48]. Na cadeia finita, o estado fundamental é não degenerado para qualquer valor do parâmetro de anisotropia α . A energia deste estado é analítica em α e o sistema não tem ordem de longo alcance [42]. Todavia, a tendência do sistema a ordem se manifesta através das funções de correlação [28,32].

5.1 - Função de Onda do Estado Fundamental

Além de calcular os autovalores, o método de Lanczos [26,27] pode também ser usado para calcular os autovetores do Hamiltoniano. Neste caso os vetores da base de Lanczos, gerados durante o processo de iteração, precisam ser guardados na memória do computador (cada um destes vetores tem a dimensão do Hamiltoniano; ver tabela 3.1). Este consumo adicional de memória

necessário para se obter a função de onda, limita o número de passos do processo de Lanczos, com a conseqüente redução na precisão dos resultados. O tempo de execução da computação também aumenta, já que a máquina necessita fazer um número maior de paginações. Em face disto, os autovetores foram calculados com uma exatidão de 10^{-9} , para cadeias com tamanho máximo $N = 24$. Em particular, no ponto isotrópico obtemos a função de onda até $N = 26$ com uma precisão de sete dígitos decimais. Para determinar somente a energia, apenas dois vetores precisam ser armazenados ao longo do processo de iteração (ver seção 2.2), permitindo assim cálculos em cadeias de até 28 spins com uma convergência de 10^{-14} .

O Hamiltoniano de Heisenberg-Ising comuta com a componente S_z do spin total. Portanto, o estado fundamental $|\psi_0\rangle$ pode ser representado como uma combinação linear de componentes $|\phi_i\rangle$ contidas no subespaço de $S_z = 0$ (autoestados de Ising):

$$|\psi_0\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle \quad (5.1)$$

Na região $0 \leq \alpha < 1$, o estado fundamental tem ordem de longo alcance. Para forte anisotropia, os estados de Néel são as componentes dominantes na superposição quântica em (5.1). Estes são estados onde a projecção s_x do spin em cada sítio ao longo da cadeia vale alternadamente $1/2$ e $-1/2$. Há dois estados de Néel, relacionados entre si por simetria de inversão temporal. Seus pesos diminuem à medida que a anisotropia é reduzida. Outras contribuições à função de onda do estado fundamental, em ordem

hierárquica, vêm de configurações obtidas dos estados de Néel virando pares de spins vizinhos (um par, dois pares, etc.; em combinações lineares com simetria de translação). O peso relativo destas configurações aumenta quando o sistema sai do regime de Ising em direção ao ponto isotrópico, assim reduzindo o momento magnético líquido. Para ilustrar o efeito acima, mostramos na tabela 5.1, resultados do nosso cálculo para o peso das três mais importantes componentes do estado fundamental normalizado, de uma cadeia com 24 spins, em função do parâmetro de anisotropia α .

5.2 - Funções de Correlação e Magnetização Espontânea

As principais características do estado fundamental podem ser sintetizadas em termos da função de correlação:

$$W(N, l) \equiv \langle \psi_0(N) | S_z(m) S_z(m+l) | \psi_0(N) \rangle \quad (5.2)$$

onde S_z é o operador de spin no sítio m , e l denota a distância entre os sítios. Para condições de contorno periódicas temos obviamente $W(N, l) \equiv W(N, N-l)$, independentemente do sítio m . Como mostrado por Bonner e Fischer [57], a função de correlação,

$$\omega(N, l) \equiv 4(-1)^l W(N, l) \quad (5.3)$$

para os spins mais distantes na cadeia (em um anel a distância máxima é $l = N/2$), extrapola ao quadrado da magnetização

α	$2 \times P_N$	$48 \times P_1$	$48 \times P_2$
0.1	0.94184	0.05623	0.00056
0.2	0.78761	0.18526	0.00722
0.3	0.58625	0.30258	0.02541
0.4	0.38799	0.34413	0.04937
0.5	0.22645	0.30122	0.06436
0.6	0.12105	0.22030	0.06336
0.7	0.06580	0.15255	0.05409
0.8	0.03888	0.10867	0.04450
0.9	0.02515	0.08134	0.03684
1.0	0.01754	0.06376	0.03106

Tabela 5.1 - Pesos das três mais importantes componentes da função de onda do estado fundamental de uma cadeia de 24 spins, para alguns valores do parâmetro de anisotropia α . P_N refere-se aos estados de Néel, enquanto P_1 e P_2 referem-se a configurações obtidas dos estados de Néel com um e dois pares de spins vizinhos virados, respectivamente. Os números em frente indicam a multiplicidade correspondente.

espontânea M_0 , no limite $N \rightarrow \infty$:

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \omega(N, l) \equiv \lim_{l \rightarrow \infty} \omega(\infty, l) \equiv M_0^2 \quad (5.4)$$

Na figura 5.1, mostramos nossos resultados para a função de correlação $W(N, N/2)$ de uma cadeia com 24 spins em função da anisotropia α . O resultado analítico de Baxter [44] para a magnetização espontânea alternante do sistema infinito é também mostrado para comparações. Efeitos de tamanho tornam-se evidentes quando o comprimento de correlação ξ_∞ é da ordem do tamanho do sistema. Como é visível na figura, isto acontece perto do ponto isotrópico. De fato, à medida que nos aproximamos da região crítica, $\xi_\infty(\alpha)$ cresce e diverge exatamente no ponto de Heisenberg, onde ocorre a transição de fases de segunda ordem a $T = 0$. Para estes valores do parâmetro α , nossos dados se distanciam da solução analítica devido às fortes correções de tamanho.

Na região anisotrópica, a pequena precisão dos dados e efeitos de cruzamento para alguns valores da anisotropia, dificultam extrapolações das funções de correlação ao limite termodinâmico, de modo que resultados obtidos usando o algoritmo VBS [82] são incertos. Para o ponto isotrópico, em especial, realizamos uma computação mais precisa. Dados para todas as funções de correlação são apresentados no apêndice 3, para cadeias com até 26 spins e $\alpha = 1$. Resultados extrapolados são mostrados na tabela 5.2, juntamente com valores analíticos para a cadeia infinita. Pelo fato do algoritmo VBS requerer seqüências originais

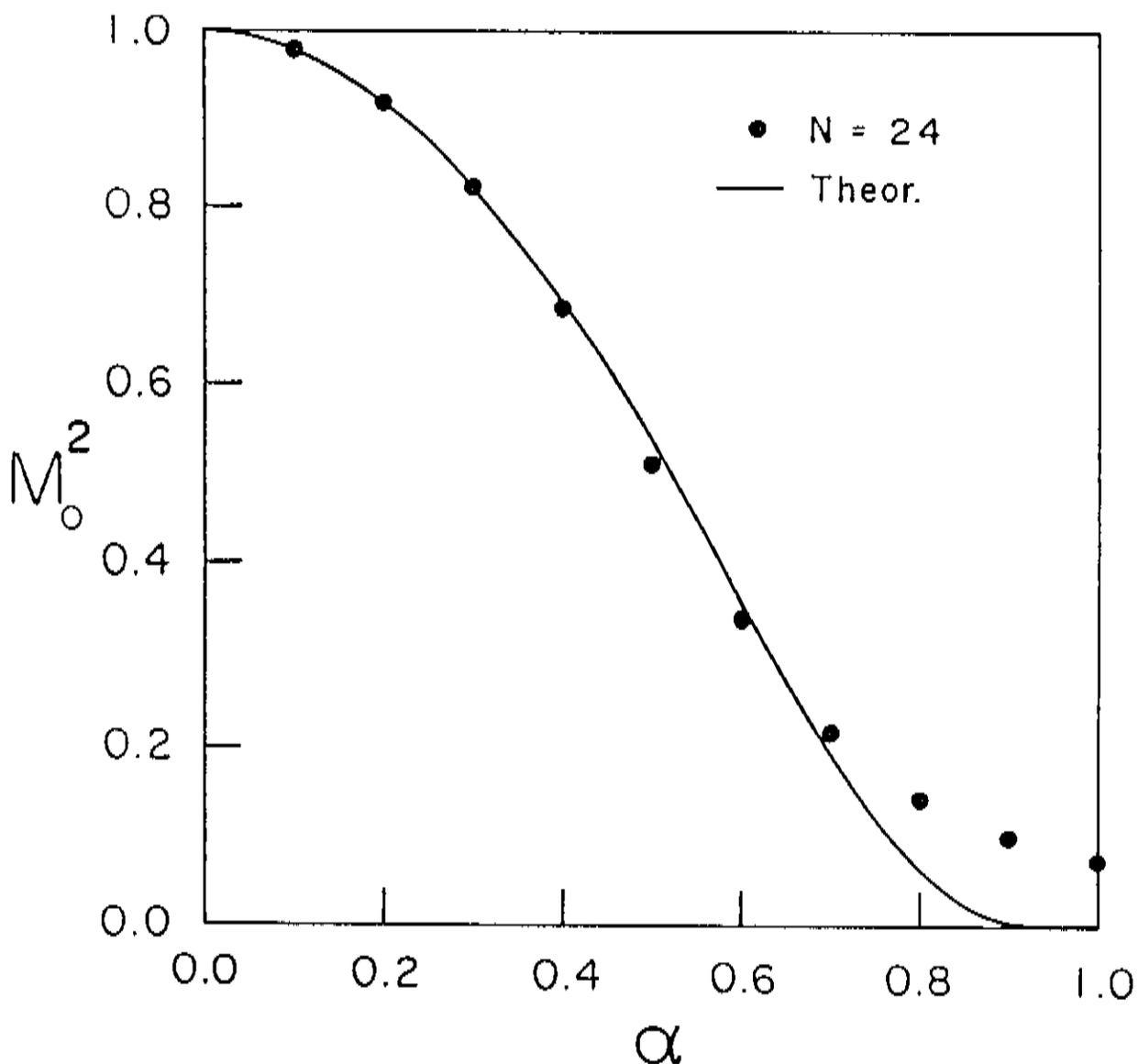


Figura 5.1 - Função de correlação $\omega(N, N/2)$ para $N = 24$, em função de α . O limite de $\omega(N, N/2)$, com $N \rightarrow \infty$, corresponde ao quadrado da magnetização alternante M_0 . Nossos dados são comparados com o resultado teórico para a cadeia infinita da Ref. 44. Nas proximidades do ponto isotrópico, os efeitos de tamanho tornam-se evidentes devido ao crescimento do comprimento de correlação $\xi_\infty(\alpha)$. Exatamente em $\alpha = 1$, ξ_∞ diverge.

$ W(l) $		
l	<i>Extrap.</i>	<i>Anal.</i>
1	0.147714	0.147716
2	0.060673	0.060680
3	0.050249	-
4	0.034652	-
5	0.030888	-
6	0.024446	-
7	0.022494	-
8	0.018979	-
9	0.017757	-
∞	0.010683	0.000000

Tabela 5.2 - Valores extrapolados para as funções de correlação $|W(N,l)|$ de cadeias isotrópicas. Dados foram obtidos para sistemas até $N = 26$. Aplicações do algoritmo VBS requerem no mínimo cinco termos, de modo que extrapolações a $N \rightarrow \infty$ são possíveis até $l = 9$. Resultados analíticos exatos são disponíveis apenas para $W(\infty,1)$ (Ref. 20), $W(\infty,2)$ (Ref. 97) e $W(\infty,\infty)$ (Ref. 44). A extrapolação dos nossos dados a $l \rightarrow \infty$ é também mostrada.

que tenham no mínimo cinco termos, extrapolações foram possíveis até $l = 9$. Infelizmente, resultados analíticos existem apenas para as funções de correlação de primeiros [20] e de segundos vizinhos [97], e para $W(\infty, \infty)$ [44]. Há uma concordância muito boa entre os valores analíticos para $W(\infty, 1)$ e $W(\infty, 2)$ e nossos respectivos resultados extrapolados, assim nos levando à convicção de que as extrapolações das outras funções de correlação ao limite $N \rightarrow \infty$ também estão corretas.

Para avaliar a magnetização espontânea, é necessário extrapolar a $l \rightarrow \infty$ as funções de correlação $W(\text{extrap.}, l)$. Nosso resultado,

$$|W(\text{extrap.}, \text{extrap.})| = 0.010683 \quad (5.5)$$

concorda com o valor analítico $W(\infty, \infty) = 0$, dentro de uma precisão de aproximadamente 1%. A pequena discrepância entre os dois resultados pode ser devida à propagação de erros de arredondamento nos processos de extrapolação ou a possíveis correções logarítmicas [24, 98, 99], de modo que cálculos numéricos extremamente acurados são necessários para esclarecer esta questão.

CONCLUSÕES

Quantidades físicas importantes foram obtidas numericamente para a cadeia de Heisenberg-Ising de spin $s = 1/2$, com interações antiferromagnéticas e condições de contorno periódicas, resolvendo o Hamiltoniano como função do tamanho N e do parâmetro de anisotropia α .

Para a diagonalização de grandes matrizes, o método de Lanczos se revelou uma técnica muito eficiente. Autovalores e correspondentes autovetores são calculados por este método de uma forma iterativa e com uma precisão da ordem do erro aritmético da máquina, como podemos comprovar por comparações com valores computados para cadeias muito pequenas usando a diagonalização direta. Em relação ao tempo de processamento, uma grande redução foi conseguida via a técnica de *hashing*. Dados de redes finitas são convenientemente analisados por meio de ajustes de curvas ou por esquemas numéricos mais elaborados. Estes procedimentos, juntamente com a teoria de *finite-size scaling*, permitem inferir o comportamento do sistema no limite termodinâmico, como ilustrado por extrapolações usando o algoritmo VBS, onde os valores extrapolados mostraram-se em excelente concordância com resultados analíticos disponíveis para a cadeia infinita.

Na região de forte anisotropia, dados dos sistemas finitos convergem rapidamente para aqueles da rede infinita. Em particular, nós obtemos numericamente uma dependência exponencial com o tamanho para o gap de massa em todo regime anisotrópico, como sugerido por predicções do *ansatz* de Bethe. Quando nos aproximamos do ponto isotrópico, o comprimento característico para

se atingir o comportamento exponencial torna-se maior, e correções de lei de potência são dominantes para tamanhos pequenos da cadeia. Nossa computação mostra que no limite assintótico de grandes N , o gap escalado vai a zero com o inverso do tamanho para todo $0 \leq \alpha < 1$, indicando que o estado fundamental para o sistema infinito é duplamente degenerado. A função de onda deste estado pode ser representada como uma superposição linear de autoestados de Ising contidos no subespaço de $S_z = 0$. O sistema apresenta ordem de longo alcance à temperatura nula, com componentes dominantes do tipo Néel. No entanto, as flutuações quânticas devidas à parte transversa do Hamiltoniano reduzem substancialmente a magnetização espontânea por sítio, como tem sido sistematicamente observado em nosso cálculo. De fato, no limite de Ising o estado fundamental é um dos estados de Néel e a magnetização tem o valor de saturação. A inclusão da parte transversa pode ser visualizada como um processo de desordem, onde pares de spins vizinhos são virados simultaneamente. O peso relativo destas configurações aumenta à medida que nos aproximamos do limite de Heisenberg.

Exatamente no ponto isotrópico, as leis de escala mostram uma dependência do tipo lei de potência, mas com correções logarítmicas, como predito por cálculos do *ansatz* de Bethe e por argumentos da invariância conforme. O gap escalado converge muito lentamente a uma constante diferente de zero, indicando que o estado fundamental no limite termodinâmico é um singlete. Extrapolacões das funções de correlação sugerem que o estado

fundamental não tem ordem de longo alcance, em concordância com a solução analítica para a rede infinita. Uma interessante mudança na tendência com o tamanho da velocidade da onda de spin é predita por nossa computação para tamanhos $N \sim 50$. Este tipo de comportamento e a correspondente lei de escala não tem sido discutidos na literatura.

Uma análise sem ambiguidades de cálculos em sistemas finitos deve ser geralmente complementada por aproximações analíticas, especialmente quando computações numéricas são possíveis apenas para tamanhos pequenos. Este fato precisa ser levado em conta nos cálculos para outros valores de spin, assim como em duas ou três dimensões. Procedimentos de extrapolação ingênuos, podem levar a conclusões erradas acerca do limite termodinâmico, particularmente quando singularidades essenciais estão presentes.

REFERÊNCIAS

- [1] M. Steiner, J. Villain, and C. G. Windsor, *Adv. Phys.* **25**, 87 (1976); R. J. Birgeneau and G. Shirane, *Phys. Today* **31**, No. 12, 32 (1978); L. P. Regnault *et. al.*, *Physica B* **156** & **157**, 247 (1989); (revisão)
- [2] E. H. Lieb and D. C. Mattis, *Mathematical Physics in One Dimension* (Academic Press, New York, 1966).
- [3] N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [4] W. Heisenberg, *Z. Phys.* **49**, 619 (1928).
- [5] F. Keffer, in *Encyclopedia of Physics*, ed. S. Flugge (Springer-Verlag, Berlin, 1966), Vol. XVIII/2, p. 1; D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism I* (Springer-Verlag, Berlin, 1981), Cap. 5; (revisão).
- [6] L. J. de Jongh and A. R. Miedema, *Adv. Phys.* **23**, 1 (1974); L. J. de Jongh, *J. Appl. Phys.* **49**, 1305 (1978); (revisão).
- [7] J. C. Bonner, *J. Appl. Phys.* **49**, 1299 (1978); J. C. Bonner *et. al.*, in *Physics in One Dimension*, eds. J. Bernasconi and T. Schneider (Springer-Verlag, Berlin, 1981), p. 115; I. Affleck, *J. Phys. Cond. Matt.* **1**, 3047 (1989); (revisão).
- [8] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [9] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [10] R. J. Birgeneau, *Am. J. Phys.* **58**, 28 (1990); (revisão).
- [11] V. J. Emery, *J. Appl. Phys.* **67**, 4666 (1990); J. R. Schrieffer, *Int. J. Mod. Phys. B* **4**, 1611 (1990); (revisão).
- [12] R. B. Griffiths, *Phys. Rev.* **135**, A659 (1964).
- [13] Y. Endoh *et. al.*, *Phys. Rev. Lett.* **32**, 170 (1974).
- [14] G. G. Cabrera, *Phys. Rev. B* (no prelo).

- [15] P. W. Kasteleyn, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics III*, ed. E. G. D. Cohen (North-Holland, Amsterdam, 1975), p. 103; (revisão).
- [16] J. B. Kogut, *Rev. Mod. Phys.* **51**, 659 (1979); (revisão).
- [17] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [18] M. Gaudin, *La Fonction d'Onde de Bethe* (Masson, Paris, 1983); A. M. Tsvelick and P. B. Wiegmann, *Adv. Phys.* **32**, 453 (1983); (revisão).
- [19] M. Lagos and G. G. Cabrera, *Phys. Rev. B* **38**, 659 (1988); G. Gómez-Santos, *ibid.* **41**, 6788 (1990).
- [20] L. Hulthén, *Ark. Mat. Astron. Fys.* **26** A, No. 11, 1 (1938).
- [21] H. J. de Vega and F. Woytarovich, *Nucl. Phys. B* **251**, 439 (1985).
- [22] F. Woytarovich and H-P. Eckerle, *J. Phys. A* **20**, L97 (1987).
- [23] J. L. Cardy, *J. Phys. A* **19**, L1093 (1986); **20**, 5039 (1987).
- [24] I. Affleck, D. Gepner, H. J. Schulz, and T. Ziman, *J. Phys. A* **22**, 511 (1989).
- [25] M. E. Fisher, in *Critical Phenomena*, ed. M. S. Green (Academic Press, New York, 1971), p. 1; M. N. Barber, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, eds. C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic Press, London, 1983), Vol. 8, p. 145; *Finite-Size Scaling*, ed. J. L. Cardy (North-Holland, Amsterdam, 1988); (revisão).
- [26] C. Lanczos, *J. Res. Natl. Bur. Stand.*, **45**, 255 (1950).
- [27] C. C. Paige, *J. Inst. Math. Its Appl.* **10**, 373 (1972); **18**, 341 (1976).

- [28] G. G. Cabrera, D. Medeiros, and M. Lagos, in *Progress in High Temperature Superconductivity*, eds. R. Nicolisky et. al. (World Scientific, Singapore, 1988), Vol. 9, p. 295.
- [29] D. Medeiros and G. G. Cabrera, in *Actas del Séptimo Simposio Chileno de Física*, ed. Universidad de Santiago de Chile (Santiago, 1990), p. 39.
- [30] D. Medeiros and G. G. Cabrera, *Phys. Rev. B* **43** (no prelo).
- [31] D. Medeiros and G. G. Cabrera, *Phys. Rev. B* (no prelo).
- [32] D. Medeiros and G. G. Cabrera, *Rev. Bras. Fis.* (no prelo).
- [33] J. L. Cardy, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, eds. C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic Press, London, 1987), Vol. 11, p. 55, (revisão).
- [34] E. Ising, *Z. Phys.* **31**, 253 (1925).
- [35] F. Bloch, *Z. Phys.* **61**, 206 (1930).
- [36] W. Marshall, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A232**, 48 (1955).
- [37] R. Orbach, *Phys. Rev.* **112**, 309 (1958).
- [38] L. R. Walker, *Phys. Rev.* **116**, 1089 (1959).
- [39] J. des Cloizeaux and J. J. Pearson, *Phys. Rev.* **128**, 2131 (1962).
- [40] E. Lieb and D. Mattis, *J. Math. Phys.* **3**, 749 (1962).
- [41] J. des Cloizeaux and M. Gaudin, *J. Math. Phys.* **7**, 1384 (1966).
- [42] C. N. Yang and C. P. Yang, *Phys. Rev.* **150**, 321 (1966); **150**, 327 (1966); **151**, 258 (1966).
- [43] R. B. Griffiths, *Phys. Rev.* **133**, A768 (1964).
- [44] R. J. Baxter, *J. Phys. C* **6** L94 (1973); *J. Stat. Phys.* **9**, 145

(1973).

- [45] E. H. Lieb, T. D. Schultz, and D. C. Mattis, *Ann. Phys. (N. Y.)* **16**, 407 (1961).
- [46] B. Sutherland, *J. Math. Phys.* **11**, 3183 (1970).
- [47] M. Kohmoto, M. den Nijs, and L. P. Kadanoff, *Phys. Rev. B* **24**, 5229 (1981); J. Sólyom and P. Pfeuty, *ibid.* **24**, 218 (1981).
- [48] A. Luther and I. Peschel, *Phys. Rev B* **12**, 3908 (1975).
- [49] A. Luther, *Phys. Rev. B* **14**, 2153 (1976); S. Coleman, *Phys. Rev. D* **11**, 2088 (1975).
- [50] F. D. M. Haldane, *Phys. Lett.* **03A**, 464 (1983); *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
- [51] B. M. McCoy and T. T. Wu, *Nuovo Cimento* **56B**, 311 (1968).
- [52] F. Rys, *Helv. Phys. Acta* **36**, 537 (1963).
- [53] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948).
- [54] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **46**, 1337 (1971); **56**, 1454 (1976); E. Fradkin and L. Susskind, *Phys. Rev. D* **17**, 2637 (1978).
- [55] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [56] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982).
- [57] J. C. Bonner and M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **135**, A640 (1964).
- [58] B. A. Scheibner *et. al.*, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 590 (1979), M. R. Meadows *et. al.*, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 592 (1979); P. Sheng, R. W. Cohen, and J. R. Schrieffer, *J. Phys. C* **14**, L565 (1981).
- [59] C. J. Hamer, *J. Phys. A* **18**, L1133 (1985); **19**, 3335 (1986); L.

V. Avdeev and B-D. Dörfel, *ibid.* **19**, L13 (1986); F. C. Alcaraz, M. N. Barber, and M. T. Batchelor, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 771 (1987); *Ann. Phys. (N. Y.)* **182**, 280 (1988).

[60] W. Grieger, *Phys. Rev. B* **30**, 344 (1984); J. Borysowicz, T. A. Kaplan, and P. Horsch, *Phys. Rev. B* **31**, 1590 (1985).

[61] L. A. Takhtajan, *Phys. Lett.* **87A**, 479 (1982).

[62] H. M. Babujian, *Phys. Lett.* **90A**, 479 (1982); *Nucl. Phys. B* **215**, 317 (1983).

[63] R. Botet and R. Jullien, *Phys. Rev. B* **27**, 613 (1983); M. P. Nightingale and H. W. J. Blöte, *ibid.* **33**, 659 (1986).

[64] *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, ed. K. Binder (Springer-Verlag, Berlin, 1979); *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, ed. K. Binder (Springer-Verlag, Berlin, 1984); M. H. Kalos and P. A. Whitlock, *Monte Carlo Methods* (John Wiley, New York, 1986), Vol. I.

[65] H. F. Trotter, *Proc. Am. Math. Soc.* **10**, 545 (1959).

[66] M. Suzuki, in *Quantum Monte Carlo Methods*, ed. M. Suzuki (Springer-Verlag, Berlin, 1987), p. 2; (revisão).

[67] J. E. Hirsch *et. al.*, *Phys. Rev. B* **26**, 5033 (1982); J. R. Borysowicz *et. al.*, *Nucl. Phys. B* **300**, 301 (1988).

[68] J. H. Wilkinson, *The Algebraic Eigenvalue Problem* (Clarendon Press, Oxford, 1965).

[69] D. Knuth, *The Art of Computer Programming* (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1973), Vol. 3, Sec. 6.4.

[70] S. Kaniel, *Math. Comp.* **20**, 369 (1966).

- [71] J. Cullum and R. A. Willoughby, *J. Comp. Phys.* **44**, 329 (1981).
- [72] T. Sebe and J. Nachamkin, *Ann. Phys.* **51**, 100 (1969); R. R. Whitehead, in *Theory and Applications of Moment Methods in Many-Fermion Systems*, eds. B. J. Dalton *et. al.* (Plenum Press, New York, 1980), p. 235; (revisão).
- [73] R. Haydock, *Sol. Stat. Phys.* **35**, 215 (1980); (revisão).
- [74] H. H. Roomany, H. W. Wyld, and L. E. Holloway, *Phys. Rev. D* **21**, 1557 (1980).
- [75] J. K. Cullum and R. A. Willoughby, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations* (Birkhäuser, Stuttgart, 1985), Vol. 1.
- [76] D. A. Smith and W. F. Ford, *SIAM J. Numer. Anal.* **16**, 223 (1979); *Math. Comp.* **38**, 481 (1982).
- [77] P. Henrici, *Essentials of Numerical Analysis* (John Wiley, New York, 1982), Cap. 2.
- [78] D. C. Joyce, *SIAM Review* **13**, 435 (1970).
- [79] C. Brezinski, *Rend. Mat.* **7**, 303 (1974).
- [80] C. J. Hamer and M. N. Barber, *J. Phys. A* **14**, 2009 (1981).
- [81] D. Shanks, *J. Math. Phys.* **34**, 1 (1955).
- [82] J-M. Vanden Broeck and L. W. Schwartz, *SIAM J. Math. Anal.* **10**, 658 (1979).
- [83] P. Wynn, *Numer. Math.* **8**, 264 (1966).
- [84] M. N. Barber and C. J. Hamer, *J. Austral. Math. Soc. B* **23**, 229 (1982).
- [85] F. Beleznyay, *J. Phys. A* **19**, 551 (1986); M. Henkel and G.

Schütz, J. Phys. A **21**, 2617 (1988).

[86] J. B. Parkinson and J. C. Bonner, Phys. Rev. B **32**, 4703 (1985); E. R. Gagliano *et. al.*, *ibid.* **34**, 1677 (1986); **35**, 5297 (1987); H. Betsuyaku, *ibid.* **34**, 8125 (1986); T. Barnes and G. J. Daniell, *ibid.* **37**, 3637 (1988).

[87] T. Oguchi and H. Kitatani, Prog. Theor. Phys. **79**, 253 (1988).

[88] J. D. Johnson, S. Krinsky, and B. M. McCoy, Phys. Rev. A **8**, 2526 (1973).

[89] H. Betsuyaku, Phys. Rev. B **36**, 5613 (1987).

[90] J. Sólyom, Phys. Rev. B **38**, 11920 (1988).

[91] R. Botet, R. Jullien, and M. Kolb, Phys. Rev. B **29**, 5222 (1984).

[92] J. C. Bonner and G. Müller, Phys. Rev. B **29**, 5216 (1984).

[93] G. G. Cabrera and R. Jullien, Phys. Rev. Lett. **57**, 393 (1986); Phys. Rev. B **35**, 7062 (1987); G. G. Cabrera, Int. J. Mod. Phys. B **4**, 1671 (1990).

[94] J. C. Bonner and G. Müller, J. Appl. Phys. **55**, 2395 (1984); J. Sólyom and T. A. L. Ziman, Phys. Rev. B **30**, 3980 (1984).

[95] A. Moreo, Phys. Rev. B **36**, 8582 (1987).

[96] P. R. Bevington, *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences* (McGraw-Hill, New York, 1969).

[97] M. Takahashi, J. Phys. C **10**, 1289 (1977).

[98] K. Kubo, T. A. Kaplan, and J. R. Borysowicz, Phys. Rev. B **38**, 11550 (1988); S. Liang, Phys. Rev. Lett. **64**, 1597 (1990).

[99] R. R. P. Singh and M. E. Fisher, Phys. Rev. B **39**, 2562 (1989); T. Giamarchi and H. J. Schulz, *ibid.* 4620 (1989).

APÊNDICE 1

VALORES EXATOS PARA AS ENERGIAS
DO ESTADO FUNDAMENTAL E DO PRIMEIRO ESTADO EXCITADO

----- ALFA = 0.05 -----

N	E0	E1
4	-0.25124381172953	-0.250000000000000
6	-0.25065561052764	-0.25059357744888
8	-0.25062654344684	-0.25062267509898
10	-0.25062474447904	-0.25062447426976
12	-0.25062461948720	-0.25062459926309
14	-0.25062461016808	-0.25062460858223
16	-0.25062460943945	-0.25062460931085
18	-0.25062460938050	-0.25062460936980
20	-0.25062460937561	-0.25062460937470
22	-0.25062460937519	-0.25062460937511
24	-0.25062460937515	-0.25062460937515
26	-0.25062460937515	-0.25062460937515
28	-0.25062460937515	-0.25062460937515

----- ALFA = 0.10 -----

N	E0	E1
4	-0.25490381056767	-0.250000000000000
6	-0.25273543048233	-0.25225018877661
8	-0.25252377993080	-0.25246367073352
10	-0.25249792129141	-0.25248957736900
12	-0.25249437068426	-0.25249312935119
14	-0.25249384679018	-0.25249365328698
16	-0.25249376563724	-0.25249373444123
18	-0.25249375261862	-0.25249374745990
20	-0.25249375047435	-0.25249374960417
22	-0.25249375011383	-0.25249374996468
24	-0.25249375005221	-0.25249375002631
26	-0.25249375004153	-0.25249375003698
28	-0.25249375003966	-0.25249375003885

----- ALFA = 0.25 -----

N	E0	E1
4	-0.27809310892395	-0.25000000000000
6	-0.26846905693193	-0.26195793506818
8	-0.26631348483000	-0.26439803654797
10	-0.26569414952043	-0.26505937622693
12	-0.26549317229492	-0.26526721223983
14	-0.26542297750887	-0.26533859845869
16	-0.26539720129014	-0.26536459053952
18	-0.26538738306083	-0.26537444909555
20	-0.26538353723343	-0.26537830263468
22	-0.26538199728148	-0.26537984408875
24	-0.26538136961458	-0.26538047205262
26	-0.26538111003023	-0.26538073169641
28	-0.26538100136079	-0.26538084037787

----- ALFA = 0.30 -----

N	E0	E1
4	-0.28893596310755	-0.25000000000000
6	-0.27678871208334	-0.26634440234258
8	-0.27369570865286	-0.27011681386138
10	-0.27266752584562	-0.27128062836402
12	-0.27227843027005	-0.27169996987134
14	-0.27211948394012	-0.27186612617212
16	-0.27205115856807	-0.27193624836843
18	-0.27202068583154	-0.27196718340450
20	-0.27200670821617	-0.27198128286233
22	-0.27200015304280	-0.27198787076007
24	-0.27199702311136	-0.27199100961532
26	-0.27199550632728	-0.27199252886357
28	-0.27199476209510	-0.27199327378338

----- ALFA = 0.35 -----

N	E0	E1
4	-0.30089059099338	-0.250000000000000
6	-0.28641906134806	-0.27114850198581
8	-0.28239404804920	-0.27650892121209
10	-0.28090711871624	-0.27833090934499
12	-0.28027511874159	-0.27905794172279
14	-0.27998348511737	-0.27937859714089
16	-0.27984148622362	-0.27952990029611
18	-0.27976966782128	-0.27960480546940
20	-0.27973229384997	-0.27964322989334
22	-0.27971240537652	-0.27966348296030
24	-0.27970162905422	-0.27967438783674
26	-0.27969570227743	-0.27968036053022
28	-0.27969240150448	-0.27968367788141

----- ALFA = 0.40 -----

N	E0	E1
4	-0.31374586088177	-0.250000000000000
6	-0.29717074422514	-0.27630293066785
8	-0.29227921865512	-0.28347363493239
10	-0.29033451995913	-0.28609725280702
12	-0.28943531612709	-0.28722772700135
14	-0.28898051882657	-0.28776808117024
16	-0.28873663107203	-0.28804539338637
18	-0.28860039079729	-0.28819519907083
20	-0.28852195904978	-0.28827929249635
22	-0.28847574931671	-0.28832791615281
24	-0.28844801710881	-0.28835669502716
26	-0.28843112071991	-0.28837405147295
28	-0.28842069535349	-0.28838468134948

----- ALFA = 0.45 -----

N	E0	E1
4	-0.32733017570298	-0.250000000000000
6	-0.30885802108737	-0.28175373641582
8	-0.30319114760376	-0.29092512611935
10	-0.30082535130933	-0.29447682209463
12	-0.29966637810838	-0.29609893348741
14	-0.29904075440637	-0.29692257635494
16	-0.29868063201620	-0.29737269382016
18	-0.29846377706581	-0.29763225396707
20	-0.29832880012710	-0.29778814893280
22	-0.29824264389167	-0.29788480103207
24	-0.29818655224757	-0.29794625903062
26	-0.29814944755919	-0.29798614902367
28	-0.29812457816738	-0.29801248196263

----- ALFA = 0.50 -----

N	E0	E1
4	-0.34150635094611	-0.250000000000000
6	-0.32131437555300	-0.28745747856526
8	-0.31496429399669	-0.29879156926825
10	-0.31222918281046	-0.30337979866583
12	-0.31083822397962	-0.30557067592334
14	-0.31005430303590	-0.30673491335299
16	-0.30958079689111	-0.30740170103699
18	-0.30928029529838	-0.30780527126425
20	-0.30908245899502	-0.30806007948009
22	-0.30894850128483	-0.30822640851044
24	-0.30885577355721	-0.30833793148762
26	-0.30879044009011	-0.30841436812676
28	-0.30874373736571	-0.30846772298467

----- ALFA = 0.55 -----

N	E0	E1
4	-0.35616552511134	-0.250000000000000
6	-0.33439858727593	-0.29337895137668
8	-0.32744577969463	-0.30701339377407
10	-0.32439281691845	-0.31272972628617
12	-0.32280410792566	-0.31555460978959
14	-0.32188454952959	-0.31710839329020
16	-0.32131209288329	-0.31802997229484
18	-0.32093641390997	-0.31860804283430
20	-0.32067987051248	-0.31898662687084
22	-0.32049918920012	-0.31924319395769
24	-0.32036877672869	-0.31942196210298
26	-0.32027275948237	-0.31954940970308
28	-0.32020090218153	-0.31964203204610

----- ALFA = 0.60 -----

N	E0	E1
4	-0.37122144504490	-0.250000000000000
6	-0.34799479325040	-0.29948940236737
8	-0.34050416020538	-0.31554133186451
10	-0.33717688653030	-0.32246245702867
12	-0.33542185223459	-0.32597541559856
14	-0.33439010188035	-0.32795912314411
16	-0.33373640798900	-0.32916696478317
18	-0.33329892660451	-0.32994486041393
20	-0.33299366589623	-0.33046809626486
22	-0.33277356554858	-0.33083243048516
24	-0.33261062833910	-0.33109337408322
26	-0.33248737449831	-0.33128469192333
28	-0.33239244872034	-0.33142775483792

----- ALFA = 0.65 -----

N	E0	E1
4	-0.38660561920570	-0.250000000000000
6	-0.36200965844509	-0.30576515395816
8	-0.35403120569184	-0.32433458654836
10	-0.35046334478655	-0.33252452441409
12	-0.34856691827865	-0.33676983875766
14	-0.34744236616419	-0.33921604225348
16	-0.34672297371674	-0.34073525533600
18	-0.34623637041110	-0.34173303896381
20	-0.34589285120406	-0.34241741043835
22	-0.34564200543783	-0.34290335519844
24	-0.34545374808672	-0.34325830523333
26	-0.34530923283418	-0.34352374799924
28	-0.34519617280744	-0.34372624256789

----- ALFA = 0.70 -----

N	E0	E1
4	-0.40226341266023	-0.250000000000000
6	-0.37636863280215	-0.31218654173274
8	-0.36793992698868	-0.33335924647627
10	-0.36415632390802	-0.34287142438401
12	-0.36213675242536	-0.34788512166491
14	-0.36093364485846	-0.35081972438307
16	-0.36016012241498	-0.35266988373534
18	-0.35963404668559	-0.35390293411389
20	-0.35926047217481	-0.35476090096340
22	-0.35898595143381	-0.35537880367882
24	-0.35877853002402	-0.35583652791209
26	-0.35861815337173	-0.35618364887250
28	-0.35849172165678	-0.35645217228883

----- ALFA = 0.75 -----

N	E0	E1
4	-0.41815098498896	-0.250000000000000
6	-0.39101229833640	-0.31873709640452
8	-0.38216120357970	-0.34258697247287
10	-0.37817966703468	-0.35346603641574
12	-0.37604971853038	-0.35927732527686
14	-0.37477786117728	-0.36272072842140
16	-0.37395809018612	-0.36491683764368
18	-0.37339908382051	-0.36639664980234
20	-0.37300101427245	-0.36743731409754
22	-0.37270763093068	-0.36819457881399
24	-0.37248526994108	-0.36876123586349
26	-0.37231278238548	-0.36919525424906
28	-0.37217633922040	-0.36953430002073

----- ALFA = 0.80 -----

N	E0	E1
4	-0.43423292192132	-0.250000000000000
6	-0.40589320743780	-0.32540291160433
8	-0.39664029242813	-0.35199393459029
10	-0.39247341678049	-0.36427727004398
12	-0.39024181805682	-0.37090978208012
14	-0.38890772961342	-0.37487793046143
16	-0.38804683130396	-0.37743132194378
18	-0.38745906569018	-0.37916629367508
20	-0.38703999211612	-0.38039609456020
22	-0.38673072980442	-0.38129780046337
24	-0.38649602223214	-0.38197749350157
26	-0.38631370812776	-0.38250179209906
28	-0.38616928871501	-0.38291419834590

----- ALFA = 0.85 -----

N	E0	E1
4	-0.45048041415729	-0.250000000000000
6	-0.42097330382154	-0.33217215287844
8	-0.41133375676655	-0.36155996241002
10	-0.40699040721873	-0.37527894677640
12	-0.40466306184445	-0.38275176943950
14	-0.40327100505952	-0.38725703130921
16	-0.40237223092528	-0.39017613309175
18	-0.40175828640958	-0.39217224466396
20	-0.40132031874287	-0.39359556851985
22	-0.40099694355354	-0.39464502309612
24	-0.40075139566596	-0.39544030528657
26	-0.40056055956443	-0.39605689521780
28	-0.40040930830685	-0.39654427430888

----- ALFA = 0.90 -----

N	E0	E1
4	-0.46686985827943	-0.250000000000000
6	-0.43622188323232	-0.33903467404809
8	-0.42620696002435	-0.37126786940505
10	-0.42169338261743	-0.38644889456482
12	-0.41927427591477	-0.39477741417948
14	-0.41782702342900	-0.39982929877597
16	-0.41689241978262	-0.40312025945969
18	-0.41625387285269	-0.40538162718883
20	-0.41579826587740	-0.40700130446805
22	-0.41546180243735	-0.40820049406943
24	-0.41520626835806	-0.40911278063435
26	-0.41500763443560	-0.40982268086615
28	-0.41485017411049	-0.41038577101835

----- ALFA = 0.95 -----

N	E0	E1
4	-0.48338177967079	-0.250000000000000
6	-0.45161400644562	-0.34598171543476
8	-0.44123209703767	-0.38110291615344
10	-0.43655271257918	-0.39776822142771
12	-0.43404454330643	-0.40696480560578
14	-0.43254390130721	-0.41257053986789
16	-0.43157475582419	-0.41623772707711
18	-0.43091256788796	-0.41876704147993
20	-0.43044006516936	-0.42058473693564
22	-0.43009110477209	-0.42193467801046
24	-0.42982606539694	-0.42296456511841
26	-0.42962003208885	-0.42376809410696
28	-0.42945669799208	-0.42440702778201

----- ALFA = 1.00 -----

N	E0	E1
4	-0.500000000000000	-0.250000000000000
6	-0.46712927295533	-0.35300566479165
8	-0.45638667611714	-0.39105238298057
10	-0.45154463544920	-0.40922073467386
12	-0.44894924312043	-0.41929528364520
14	-0.44739639525336	-0.42546027314133
16	-0.44639352253855	-0.42950666739790
18	-0.44570828261298	-0.43230553539684
20	-0.44521932649382	-0.43432204930935
22	-0.44485821144389	-0.43582305639117
24	-0.44458393818905	-0.43697056169714
26	-0.44437072508404	-0.43786755492125
28	-0.44420169791229	-0.43858205683375

----- ALFA = 0.86 -----

N	E0	E1
4	-0.45374762356555	-0.250000000000000
6	-0.42401041341483	-0.33353749331801
8	-0.41429499562225	-0.36349069737904
10	-0.40991716892286	-0.37750012235879
12	-0.40757120122319	-0.38514295901769
14	-0.40616792062388	-0.38975686522517
16	-0.40526184638899	-0.39274991034035
18	-0.40464287945649	-0.39479879510503
20	-0.40420130384640	-0.39626120551046
22	-0.40387524640170	-0.39734048369727
24	-0.40362764802804	-0.39815908379914
26	-0.40343520769429	-0.39879428037070
28	-0.40328267659440	-0.39929676537267

----- ALFA = 0.87 -----

N	E0	E1
4	-0.45702033070280	-0.250000000000000
6	-0.42705402868695	-0.33490648653258
8	-0.41726316130979	-0.36542697488412
10	-0.41285108817252	-0.37972785793855
12	-0.41048664370597	-0.38754129581677
14	-0.40907223954234	-0.39226420503587
16	-0.40815893851880	-0.39533142221877
18	-0.40753500517388	-0.39743323082805
20	-0.40708986584755	-0.39893482937300
22	-0.40676116199780	-0.40004400079980
24	-0.40651154281656	-0.40088596700060
26	-0.40631752324956	-0.40153980366342
28	-0.40616373367264	-0.40205741769608

----- ALFA = 0.88 -----

N	E0	E1
4	-0.46029837458598	-0.250000000000000
6	-0.43010394299489	-0.33627906063163
8	-0.42023802305546	-0.36736867381872
10	-0.41579191873612	-0.38196199811567
12	-0.41340913211479	-0.38994659941700
14	-0.41198369638290	-0.39477885133647
16	-0.41106323538300	-0.39792045445393
18	-0.41043438634606	-0.40007532561515
20	-0.40998572312876	-0.40161620409066
22	-0.40965440498550	-0.40275533020711
24	-0.40940279144935	-0.40362070376494
26	-0.40920721482826	-0.40429320802543
28	-0.40905218564756	-0.40482596905312

----- ALFA = 0.89 -----

N	E0	E1
4	-0.46358160020887	-0.250000000000000
6	-0.43315995799031	-0.33765514576515
8	-0.42321935986106	-0.36931567667430
10	-0.41873942524082	-0.38420239230748
12	-0.41633842097883	-0.39235869521127
14	-0.41490203811419	-0.39730061137221
16	-0.41397447803434	-0.40051680014344
18	-0.41334075924421	-0.40272486124951
20	-0.41288860799890	-0.40430510220641
22	-0.41255470432488	-0.40547423678286
24	-0.41230112001033	-0.40636305247872
26	-0.41210400601102	-0.40705424631048
28	-0.41194775389647	-0.40760216751925

----- ALFA = 0.90 -----

N	E0	E1
4	-0.46686985827943	-0.250000000000000
6	-0.43622188323232	-0.33903467404809
8	-0.42620696002435	-0.37126786940505
10	-0.42169338261743	-0.38644889456482
12	-0.41927427591477	-0.39477741417948
14	-0.41782702342900	-0.39982929877597
16	-0.41689241978262	-0.40312025945969
18	-0.41625387285269	-0.40538162718883
20	-0.41579826587740	-0.40700130446805
22	-0.41546180243735	-0.40820049406943
24	-0.41520626835806	-0.40911278063435
26	-0.41500763443560	-0.40982268086615
28	-0.41485017411049	-0.41038577101835

----- ALFA = 0.91 -----

N	E0	E1
4	-0.47016300497011	-0.250000000000000
6	-0.43928953581985	-0.34041757948809
8	-0.42920062068455	-0.37322514129863
10	-0.42465357557529	-0.38870136339607
12	-0.42221647304135	-0.39720259267277
14	-0.42075842210613	-0.40236473331716
16	-0.41981682550970	-0.40573063936691
18	-0.41917348814172	-0.40804542025310
20	-0.41871445452805	-0.40970459948877
22	-0.41837545440384	-0.41093388392302
24	-0.41811798929090	-0.41186966444131
26	-0.41791785093112	-0.41259828312234
28	-0.41775919539988	-0.41317654688970

----- ALFA = 0.92 -----

N	E0	E1
4	-0.47346090168052	-0.250000000000000
6	-0.44236274004275	-0.34180379791649
8	-0.43220014739172	-0.37518738485256
10	-0.42761979810543	-0.39095966159901
12	-0.42516479842671	-0.39963407220717
14	-0.42369601440906	-0.40490674066165
16	-0.42274747102485	-0.40834775335052
18	-0.42209937738385	-0.41071604432594
20	-0.42163694334025	-0.41241478342253
22	-0.42129542721373	-0.41367419616480
24	-0.42103604776592	-0.41463348845448
26	-0.42083441870925	-0.41538083319818
28	-0.42067457945923	-0.41597427147440

----- ALFA = 0.93 -----

N	E0	E1
4	-0.47676341481172	-0.250000000000000
6	-0.44544132705048	-0.34319326692229
8	-0.43520535369865	-0.37715449565603
10	-0.43059185301087	-0.39322365609998
12	-0.42811904756664	-0.40207169926621
14	-0.42663959051928	-0.40745515214211
16	-0.42568414245854	-0.41097142115839
18	-0.42503132351229	-0.41339331006919
20	-0.42456551265523	-0.41513165965393
22	-0.42422149906164	-0.41642122824764
24	-0.42396022016883	-0.41740404521921
26	-0.42375711260911	-0.41817011952650
28	-0.42359609978914	-0.41877872972057

----- ALFA = 0.94 -----

N	E0	E1
4	-0.48007041555162	-0.250000000000000
6	-0.44852513453769	-0.34458592578911
8	-0.43821606077432	-0.37912637227687
10	-0.43356955146249	-0.39549321780001
12	-0.43107902489242	-0.40451532511222
14	-0.42958895000269	-0.41000980453846
16	-0.42862663569252	-0.41360146855345
18	-0.42796911951866	-0.41607703464997
20	-0.42749995313468	-0.41785503850173
22	-0.42715345868966	-0.41917478493773
24	-0.42689029363188	-0.42018113493230
26	-0.42668571839289	-0.42096593849555
28	-0.42652354097111	-0.42158971480664

----- ALFA = 0.95 -----

N	E0	E1
4	-0.48338177967079	-0.250000000000000
6	-0.45161400644562	-0.34598171543476
8	-0.44123209703767	-0.38110291615344
10	-0.43655271257918	-0.39776822142771
12	-0.43404454330643	-0.40696480560578
14	-0.43254390130721	-0.41257053986789
16	-0.43157475582419	-0.41623772707711
18	-0.43091256788796	-0.41876704147993
20	-0.43044006516936	-0.42058473693564
22	-0.43009110477209	-0.42193467801046
24	-0.42982606539694	-0.42296456511841
26	-0.42962003208885	-0.42376809410696
28	-0.42945669799208	-0.42440702778201

----- ALFA = 0.96 -----

N	E0	E1
4	-0.48669738732814	-0.250000000000000
6	-0.45470779267861	-0.34738057835355
8	-0.44425329781069	-0.38308403149114
10	-0.43954116303106	-0.40004854539850
12	-0.43701542374421	-0.40942000103309
14	-0.43550426128987	-0.41513720518404
16	-0.43452831666337	-0.41888003382321
18	-0.43386148006865	-0.42146315996600
20	-0.43338565832535	-0.42332057830577
22	-0.43303424534030	-0.42470072596009
24	-0.43276734222081	-0.42575415032117
26	-0.43255985937893	-0.42657639764946
28	-0.43239537561567	-0.42723047722435

----- ALFA = 0.97 -----

N	E0	E1
4	-0.49001712288604	-0.250000000000000
6	-0.45780634883493	-0.34878245856095
8	-0.44727950498972	-0.38506962516343
10	-0.44253473666441	-0.40233407167982
12	-0.43999149476140	-0.41188077594070
14	-0.43846985477162	-0.41770965238496
16	-0.43748714025953	-0.42152823122176
18	-0.43681567597562	-0.42416522527217
20	-0.43633655082558	-0.42606239208413
22	-0.43598269724495	-0.42747275372243
24	-0.43571393982007	-0.42854971180831
26	-0.43550501502774	-0.42939066738764
28	-0.43533938779670	-0.43005987891295

----- ALFA = 0.98 -----

N	E0	E1
4	-0.49334087473426	-0.250000000000000
6	-0.46090953595108	-0.35018730154072
8	-0.45031056673413	-0.38705960661701
10	-0.44553327414718	-0.40462468566232
12	-0.44297259214418	-0.41434699897752
14	-0.44144051411843	-0.42028773802945
16	-0.44045105645761	-0.42418216683231
18	-0.43977498352412	-0.42687307809187
20	-0.43929256906440	-0.42881001361776
22	-0.43893628565331	-0.43025059241012
24	-0.43866568235292	-0.43135107729041
26	-0.43845532235027	-0.43221072826508
28	-0.43828855713603	-0.43289505551722

----- ALFA = 0.99 -----

N	E0	E1
4	-0.49666853512236	-0.250000000000000
6	-0.46401722025901	-0.35159505419417
8	-0.45334633717132	-0.38905388778112
10	-0.44853662263396	-0.40692027603634
12	-0.44595855854187	-0.41681854274357
14	-0.44441607884696	-0.42287132316132
16	-0.44341990248082	-0.42684169314627
18	-0.44273923819265	-0.42958656443037
20	-0.44225354715300	-0.43156328389282
22	-0.44189484357928	-0.43303407905988
24	-0.44162240193528	-0.43415808065235
26	-0.44141061271560	-0.43503641162120
28	-0.44124271437295	-0.43573583629983

APÊNDICE 2

EXEMPLO DE UM PROCESSO DE EXTRAPOLAÇÃO
USANDO O ALGORITMO VBS

----- EXTRAPOLAÇÃO DA ENERGIA E0 -----

----- N = 4 : 28 -----

----- ALFA = 0.95 -----

----- M = 0 -----

-0.48338177967079
-0.45161400644562
-0.44123209703767
-0.43655271257918
-0.43404454330643
-0.43254390130721
-0.43157475582419
-0.43091256788796
-0.43044006516936
-0.43009110477209
-0.42982606539694
-0.42962003208885
-0.42945669799208

----- M = 1 -----

-0.43619213026915
-0.43271289791733
-0.43114712754495
-0.43030879912291
-0.42980758908151
-0.42948405483306
-0.42926306876516
-0.42910542344806
-0.42898901803259
-0.42890061921900
-0.42883190829813

----- M = 2 -----

-0.42843686464565
-0.42843851585803
-0.42843837222439
-0.42843816877038
-0.42843803059601
-0.42843794328267
-0.42843788773694
-0.42843785154019
-0.42843782730579

----- M = 3 -----

-0.42843838371876
-0.42843886073413
-0.42843773812886
-0.42843779339147
-0.42843779061508
-0.42843778382582
-0.42843777820962

----- M = 4 -----

-0.42843866209267
-0.42843778505888
-0.42843779071810
-0.42843779517215
-0.42843773652478

----- M = 5 -----

-0.42843779068181
-0.42843781163353
-0.42843779103249

----- M = 6 -----

-0.42843780469302

APÊNDICE 3

FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO NO PONTO ISOTRÓPICO

FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO $w(l, N)$

N	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$
4	-0.1666667	0.0833333		
6	-0.1557098	0.0693375	-0.0772555	
8	-0.1521289	0.0652593	-0.0629843	0.0497077
10	-0.1505149	0.0635167	-0.0577928	0.0432667
12	-0.1496498	0.0626110	-0.0552739	0.0402849
14	-0.1491321	0.0620798	-0.0538484	0.0386414
16	-0.1487979	0.0617415	-0.0529591	0.0376331
18	-0.1485694	0.0615127	-0.0523655	0.0369676
20	-0.1484065	0.0613508	-0.0519488	0.0365044
22	-0.1482861	0.0612319	-0.0516447	0.0361684
24	-0.1481947	0.0611421	-0.0514159	0.0359168
26	-0.1481236	0.0610725	-0.0512393	0.0357234

N	$l = 5$	$l = 6$	$l = 7$	$l = 8$
10	-0.0469513			
12	-0.0408035	0.0356626		
14	-0.0376995	0.0320057	-0.0340937	
16	-0.0358862	0.0299282	-0.0306258	0.0279324
18	-0.0347253	0.0286214	-0.0285601	0.0255750
20	-0.0339332	0.0277408	-0.0272154	0.0240686
22	-0.0333670	0.0271167	-0.0262847	0.0230394
24	-0.0329472	0.0266571	-0.0256108	0.0223012
26	-0.0326269	0.0263082	-0.0251056	0.0217518

N	$l = 9$	$l = 10$	$l = 11$	$l = 12$
18	-0.0269130			
20	-0.0246723	0.0230233		
22	-0.0231970	0.0213749	-0.0223039	
24	-0.0221654	0.0202377	-0.0207312	0.0196206
26	-0.0214117	0.0194150	-0.0196235	0.0184016

N	$l = 13$
26	-0.0190836