

**Efeitos de Tamanho  
na Cadeia de  
Heisenberg-Ising  
via Ansatz de Bethe**

*Eduardo Peres Novais de Sá*

# Efeitos de tamanho na Cadeia de Heisenberg-Ising via Ansatz de Bethe

por

Eduardo Peres Novais de Sá

Tese submetida ao Instituto de Física *Gleb Wataghin* para obtenção do  
título de  
Mestre em Física  
pela  
Universidade Estadual de Campinas  
Fevereiro de 1997

Orientador: Professor Doutor Guillermo Gerardo Cabrera

*Este exemplar corresponde à redação final  
da Tese de Mestrado defendida pelo  
aluno Eduardo Peres Novais de Sá e  
aprovada pela comissão julgadora*

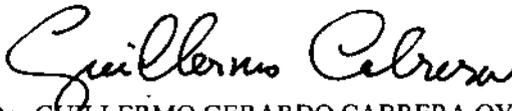
*Cidade Universitária "Zeferino Vaz",  
16 de junho de 1997*

*Guillermo Cabrera*

**PARECER DE APROVAÇÃO**  
**DEFESA DE TESE DE MESTRADO**  
**EDUARDO PERES NOVAIS DE SÁ**

DATA: 28.02.97

BANCA EXAMINADORA:



- Prof. Dr. GUILLERMO GERARDO CABRERA OYÁRZUN (Orientador)



- Prof. Dr. WAGNER FIGUEIREDO



- Profa. Dra. KYOKO FURUYA

## **Banca examinadora:**

Prof. Dr. Wagner Figueiredo

*Departamento de Física, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas,  
Universidade Federal de Santa Catarina, UFSC*

Prof. Dra. Kyoko Furuya

*IFGW, UNICAMP*

Prof. Dr. Guillerino Cabrera

*Orientador, IFGW, UNICAMP*

Prof. Dr. Djalma Medeiros

*Departamento de Física Geral e Aplicada, Universidade São Francisco,  
USF, Suplente*

Prof. Dr. Amir Caldeira

*IFGW, UNICAMP, Suplente*

A minha mãe, Aurea, e a meu pai, Izamôr.

# Índice

<b>Agradecimentos</b> .....	iii
<b>Sumário</b> .....	iv
<b>Summary</b> .....	v
<b>Capítulo 1 - Introdução</b>	
1.1 Motivações do Modelo.....	1
1.2 Hamiltoniano XXZ.....	2
1.3 Efeitos de Tamanho	
1.3.1 Introdução .....	4
1.3.2 Comprimento de Correlação.....	6
1.3.3 Efeitos de Tamanho em Sistemas Hamiltonianos.....	9
1.3.4 O que vamos estudar na cadeia XXZ antiferromagnética? ..	15
<b>Capítulo 2 - Ansatz de Bethe</b>	
2.1 Formulação do Ansatz	
2.1.1 Hipótese de Bethe .....	17
2.1.2 Equações do Ansatz .....	18
2.1.3 Quantização dos Momentos de Bethe.....	26
2.2 Considerações sobre o Ansatz de Bethe.....	27

## **Capítulo 3 - Efeitos de Tamanho no Modelo XXZ**

3.1 Introdução .....	36
3.2 Estado Fundamental .....	38
3.3 Estado do Gap de Massa .....	46
3.4 Estado da Onda de Spin Antiferromagnética .....	52
3.5 Estado da Onda de Spin Ferromagnética.....	58
3.6 Gap de Massa .....	60
3.7 Gap da Onda de Spin.....	65

## **Capítulo 4 - Discussão e Conclusão**

4 Introdução .....	72
4.1 Leis de Escala .....	76
4.2 Comprimento de Correlação.....	88
4.3 Conclusão .....	94

## **Apêndice A - Métodos de Extrapolação**

A.1 Método de Shank e VBS.....	96
A.2 Método de Taylor .....	97

<b>Bibliografia</b> .....	99
---------------------------	----

# Agradecimentos

Este trabalho não seria possível sem o apoio de minha família. Em particular, gostaria de agradecer à minha mãe Aurea, minha avó Maria, meu irmão Ricardo, minha tia Clélia e meu tio Humberto. Também gostaria de agradecer à Daniela, que nos últimos dois anos esteve sempre ao meu lado com paciência, dedicação e amor.

Sem dúvida, grande mérito cabe a meu orientador, professor Guillermo Cabrera, que além de propor inicialmente o trabalho, me incentivou constantemente através de grandes discussões sobre física em geral e em particular sobre sistemas magnéticos.

Aos amigos e colegas que ao longo dos anos compartilharam comigo dos bons e maus momentos: Alessandro Moura, Alexandre Barros, Braz de Camargo, Claudio Cardoso, Daniel Jonathan, Marcela Redigolo, Marcelo França, Marcelo Terra Cunha, Marcos Jardim e Sieghard Weinketz.

Finalmente, gostaria de agradecer ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro a este trabalho.

# Sumário

Neste trabalho, estudamos os efeitos de tamanho no hamiltoniano de Heisenberg-Ising na fase não crítica. Para tanto, utilizamos o ansatz de Bethe para resolver cadeias de spins com até mil sítios. Estudamos o comportamento, com o tamanho da cadeia, do estado fundamental antiferromagnético, do estado do gap de massa e do estado da onda de spin antiferromagnética. Além disso, estudamos o comportamento dos próprios gaps de massa e da onda de spin antiferromagnética. Nossos resultados para sistemas finitos corroboram o trabalho de Vega e Woynarovich para o estado fundamental e para estado do gap de massa. Até o momento, desconhecemos previsões analíticas para o estado da onda de spin. Sendo assim, propomos uma lei de escala para o estado da onda de spin com correções até terceira ordem. Finalmente, discutimos, qualitativamente, o comprimento de correlação da cadeia de Heisenberg-Ising, no limite termodinâmico, com base no comportamento dos sistemas finitos.

# Summary

In this thesis, we studied the size effects on Heisenberg-Ising's hamiltonian in the non-critical region. In order to do so, we used the Bethe's ansatz to solve spin chains with up to one thousand sites. We studied the behaviour, with the chain size, of the ground state, of the mass gap state and of the spin wave state. Besides that, we studied the mass gap and the spin wave gap. Our results, for finite systems, are in agreement with the work of de Vega and Woynarovich for the ground state and for the mass gap state. Up to now, we lack of knowledge about asymptotic expressions for the spin wave state. So far, we propose a scaling law for this state, with corrections of third order. Finally, we discuss, qualitatively, the correlation length for the Heisenberg-Ising chain, in the thermodynamic limit, with the behaviour of finite systems.

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Motivações do Modelo

*Basically, I suppose the justification for studying these lattice models is very simple: they are relevant and they can be solved, so why not do so and see what they tell us?*

R. J. Baxter em "Exactly Solved Models in Statistical Mechanics".

Muitas vezes os modelos de rede são criticados por serem simples e irreais, contudo eles mostram claramente as nossas limitações.

A necessidade de testar e desenvolver as definições e métodos que usamos em nosso cotidiano passa inevitavelmente pelo estudo desse sistema simples. Por exemplo, um ramo recente da física matemática que surgiu devido ao estudo de modelos de rede, são os grupos quânticos ([38], [17] e [9]).

Além disso, existe uma razão prática para estudarmos modelos solúveis exatamente. Quando a hamiltoniana microscópica é intratável analiticamente, ou ainda não foi derivada por primeiros princípios, podemos entender a física do problema via suas classes de universalidade.

*Em geral a substituição de um hamiltoniano complicado por um modelo efetivo pode ser colocado de maneira formal quando formulado a partir do grupo de Renormalização[28].*

A transformação do hamiltoniano  $H$  para o hamiltoniano efetivo  $H^{eff}$  é chamada de renormalização. Durante a renormalização algumas interações, chamadas de irrelevantes, são suprimidas. As interações que crescem ou ficam constantes são chamadas de relevantes e marginais, respectivamente. Em teoria os parâmetros do modelo efetivo podem ser derivados a partir do fluxo de renormalização do hamiltoniano inicial. Tais cálculos raramente foram feitos para materiais reais, logo se têm de ajustar os parâmetros do modelo efetivo com os resultados experimentais. Por isso, a relevância ou irrelevância de certas interações é um ponto de controvérsia entre proponentes de diferentes modelos<sup>1</sup>.

O hamiltoniano de Heisenberg é o modelo fundamental para o magnetismo quântico. Ele pode ser derivado como o limite altamente repulsivo do modelo de Hubbard de banda semi-cheia. Apesar de incluir somente os graus de liberdade de spin, tanto o estado fundamental como os estados excitados são altamente correlacionados. Isto faz com que tratamentos tipo campo médio sejam inapropriados, tornando o estudo desses sistemas muito interessante e não trivial. Em sua forma mais geral o hamiltoniano de Heisenberg é escrito como:

$$H = \sum_{\langle ab \rangle} \{ J_{ab}^x S_a^x S_b^x + J_{ab}^y S_a^y S_b^y + J_{ab}^z S_a^z S_b^z + h' S_a^z \}$$

Como a interação é anisotrópica em todas as componentes de spin, este modelo também é conhecido como modelo XYZ. Em nosso trabalho vamos considerar apenas interações entre primeiros vizinhos e nos restringir ao caso particular de  $J_{ab}^x = J_{ab}^y$ . Este é conhecido como modelo XXZ.

## 1.2 Hamiltoniano XXZ

A maneira mais geral de definir um Hamiltoniano XXZ é sobre uma rede hipercúbica de dimensão arbitrária:

---

<sup>1</sup>Retirado do livro [1] página 7-8.

$$H = \sum_{\langle ab \rangle} \{ J_{ab} [\alpha (S_a^x S_b^x + S_a^y S_b^y) + S_a^z S_b^z] + h' S_a^z \} \quad (1.1)$$

onde a soma é tomada sobre todas as combinações de dois sítios vizinhos.

Para o caso unidimensional de primeiros vizinhos e condições periódicas de contorno, temos:

$$H_O = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{J}{2} [\alpha (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + S_i^z S_{i+1}^z] + h' S_i^z \right\} \quad (1.2)$$

com  $i$  variando de 1 a  $N$ . O caso antiferromagnético na fase não crítica corresponde a  $0 \leq \alpha \leq 1$  e  $J > 0$ . Com  $\alpha = 0$  temos o modelo de Ising e para  $\alpha = 1$  o antiferromagneto isotrópico. O Hamiltoniano  $H_O$  foi estudado por Orbach em [26]. Este hamiltoniano contém de maneira clara a dependência dos parâmetros e suas implicações físicas.

Uma série de artigos de Yang-Yang, de 1966, unificaram a notação do modelo XXZ. Em [34] eles estudaram as propriedades de  $H_O$  e mostraram que a transformação unitária  $U$  (1.3) aplicada a  $H_O$  torna irrelevante o sinal de  $J$  para a determinação do espectro. Com isso, pode-se estudar simultaneamente o caso ferro e antiferromagnético.

$$U = \prod S_i^z, \quad (1.3)$$

$$H_y = \frac{U H_O U^\dagger}{J},$$

$$H_y = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{1}{2} [S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z] + h S_i^z \right\},$$

onde o produtório é tomado sobre os sítios ímpares da cadeia e usamos  $\Delta = -\frac{1}{\alpha}$ .

Nesta hamiltoniana o caso antiferromagnético na fase não crítica corresponde a  $\Delta \leq -1$ . Para  $H_y$ , Yang-Yang[35] demonstraram a existência de solução tipo ansatz de Bethe para o estado fundamental de uma cadeia finita e derivaram as propriedades da energia do estado fundamental por sítio numa cadeia infinita[36]. Para  $H_y$  o caso de Ising ocorre

quando a anisotropia é infinita. Contudo este caso está muito bem definido no Hamiltoniano  $H_0$ , inclusive com a existência de solução tipo ansatz de Bethe. Apesar de contrariar a maior parte da literatura atual, adotaremos a notação do artigo de Orbach, permitindo que comparemos os resultados da cadeia de Heisenberg com os da cadeia de Ising.

## 1.3 Efeitos de Tamanho

### 1.3.1 Introdução

Em geral um sistema de muitos corpos não pode ser resolvido de maneira analítica. Por outro lado, os teóricos encontram algum conforto no limite termodinâmico. Nesse limite, podemos calcular propriedades macroscópicas de sistemas quânticos que correspondem às que medimos em laboratório. A mecânica estatística de equilíbrio constitui então um porto seguro (apesar de conter em suas bases hipóteses não triviais).

Existe uma pergunta que sempre aparece em um primeiro curso de física estatística: Como podemos dizer que um sistema tem infinitas partículas, se na realidade do laboratório existe um número finito delas? A resposta canônica para essa indagação é que o número de partículas, na realidade, não é infinito, mas apenas em um número grande o suficiente para que os desvios das médias estatísticas sejam desprezíveis. Mas quando é que encontramos esse número mágico de partículas? É claro que ele irá depender do tipo de sistema que estamos tratando. Por exemplo: num gás ideal clássico as partículas interagem apenas por colisões. Como as interações entre as partículas são de curto alcance e aleatórias, esperamos que as propriedades termodinâmicas (médias estatísticas) do sistema não mudem muito se temos  $10^3$  ou  $10^{23}$  partículas (o importante neste caso seria a densidade delas).

Através dessas idéias definimos o que chamamos de comprimento de correlação como um comprimento característico, que depende da densidade e do tipo de interação do sistema. Se temos um sistema maior que seu comprimento de correlação, ele deve ter suas médias estatísticas praticamente invariantes por acrescentarmos um, dois ou infinitos

novos graus de liberdade. Com essa definição podemos dividir o problema de um sistema de rede finito em quatro casos bem distintos em função do tamanho do sistema (número de partículas no caso de redes):

- se os efeitos de superfícies são da ordem dos efeitos volumétricos.
- se o comprimento do sistema é muito menor que seu comprimento de correlação; neste caso podemos considerar o comprimento de correlação como infinito. Assim vale a hipótese de invariância de escala, tornando essa região equivalente a região ultravioleta de uma teoria de campo renormalizável.
- se o comprimento do sistema é da ordem de seu comprimento de correlação; esta é um caso de transição. Em certo sentido aqui é o limite da decomposição de uma quantidade física do sistema finito na soma de seu valor no limite termodinâmico com as correções de tamanho.
- se o comprimento do sistema é maior que seu comprimento de correlação ele terá seu comportamento convergindo rapidamente para o limite termodinâmico. É nessa situação que podemos definir as leis de escala (correções de tamanho).

Um comprimento de correlação finito determina uma escala absoluta para o sistema. Fica claro que haverá uma mudança na maneira que as propriedades do sistema se comportam com o tamanho ( *escalam* ), quando este for da ordem de seu comprimento de correlação.

Não existirá um comprimento característico no caso particular de termos um sistema com comprimento de correlação infinito. Assim, se dobrarmos o tamanho do sistema, suas propriedades *escaladas* ficaram inalteradas. Essa é exatamente a idéia de invariância de escala. Nessa situação muitas técnicas analíticas podem ser aproveitadas, tais como teoria de campos e principalmente invariância conforme.

Nos próximos parágrafos tentaremos formalizar o que foi discutido nessa introdução para a cadeia de Heisenberg. Como referências básicas recomendamos [32], [6] e [5].

### 1.3.2 Comprimento de Correlação

Tratemos inicialmente da cadeia de Heisenberg clássica. Nela temos como variáveis clássicas o momento magnético  $\sigma$ , a temperatura e um campo magnético externo:

$$\begin{aligned} H_{\text{clássico}} &= \sum \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sigma_i, \\ Z &= \sum e^{-\frac{H_{\text{clássico}}}{kT}}. \end{aligned}$$

Seja  $\sigma_i$  o spin clássico do sítio  $i$  (vetor de dimensão 3 e norma 1 - modelo  $O(n)$ ), definimos a função de correlação entre os sítios  $i, j$  como:

$$g_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$$

onde  $\langle \rangle$  denota a média estatística clássica. Se a cadeia apresentar invariância translacional, então  $\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle = M(h, T)$ .

Esperamos que  $g_{ij}$  seja dependente da distância entre os sítios  $i$  e  $j$ , ou seja,  $g_{ij} = g(r_{ij})$ . Longe da temperatura crítica,  $g(r)$  decai exponencialmente a zero quando  $r$  se torna grande.

$$g(r) \sim r^{-\tau} e^{-\frac{r}{\xi}}, \text{ quando } r \rightarrow \infty$$

onde  $\tau$  é um número e  $\xi$ , o comprimento de correlação. A partir da definição da hamiltoniana e da função de partição, vemos que o comprimento de correlação é uma função do campo externo e da temperatura. A interpretação física do comprimento de correlação seria a formação de domínios magnéticos com tamanho médio  $\xi$ . Se nosso sistema for muito menor que este comprimento, ele se assemelhará a um sistema crítico, onde uma pequena flutuação pode afetar todo o sistema. Nesse sentido ele se encontraria nas vizinhanças de um ponto crítico, apesar de ser um sistema finito. Uma flutuação terá seu efeito limitado a uma região, se o tamanho do sistema for muito maior que o compri-

mento de correlação. Assim, o sistema finito apresentaria um comportamento próximo do sistema termodinâmico. Isso nos leva a dizer que  $\xi$  determina uma escala absoluta para o problema.

Como discutimos na introdução esperamos que o comprimento de correlação vá para infinito, quando nos aproximamos da temperatura crítica:

$$\begin{aligned}\xi_+(h = 0, T) &\sim \left(\frac{T - T_c}{T_c}\right)^{-\nu}, \\ \xi_-(h = 0, T) &\sim \left(\frac{T - T_c}{T_c}\right)^{-\nu'},\end{aligned}$$

onde  $\nu$  e  $\nu'$  são os expoentes críticos do comprimento de correlação.

A própria função de correlação continua existindo no ponto crítico, contudo agora apresentando um comportamento de potência:

$$g(r) \sim r^{1-\eta}, \text{ quando } r \rightarrow \infty, \text{ sendo } \eta \text{ o expoente crítico.}$$

Quando passamos a estudar o problema quântico à temperatura zero, seguimos os passos dados no caso clássico. Definimos a ordem (ou correlação) de longo alcance como:

$$g_{ij}^\psi = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \langle \psi_N | S_i^z S_{i+\frac{N}{2}}^z | \psi_N \rangle - \langle \psi_N | S_i^z | \psi_N \rangle \langle \psi_N | S_{i+\frac{N}{2}}^z | \psi_N \rangle \right),$$

sendo  $\psi_N$  um auto-estado da hamiltoniana de dimensão  $2^N$ . Note que esta definição é apropriada para obtermos a partir dos sistemas finitos o comportamento da cadeia termodinâmica.

O auto-estado mais importante para a estatística do problema é o estado fundamental. Por isso definimos a função de correlação entre os sítios  $i$  e  $i + \frac{N}{2}$  da cadeia como a função  $g_{ij}$ , com a média tomada sobre este estado. Novamente esperamos que haja uma certa dependência entre  $g$  e a distância,  $r$ , entre os sítios. Dois sítios infinitamente separados não devem ter correlações entre si. Por exemplo: se aplicamos um campo magnético

em um sítio, o outro não deve ser afetado por isso. Definimos a criticalidade do modelo exatamente quando isso não é verdade. Criticalidade seria quando, apesar de termos interações locais, suas influências são não-locais. A analogia mais próxima é com a transição de fases da física estatística clássica. Assim, muitas vezes chamamos estes fenômenos de transições de fase quânticas. Usando a analogia com a física estatística clássica, definimos o comprimento de correlação do sistema quântico como o inverso do coeficiente da dependência exponencial de  $g$ , quando  $r = \frac{N}{2}$  tende ao infinito.

$$g_{i(i+r)}^{\psi^0} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \langle \psi_N^0 | S_i^z S_{i+r}^z | \psi_N^0 \rangle - \langle \psi_N^0 | S_i^z | \psi_N^0 \rangle \langle \psi_N^0 | S_{i+r}^z | \psi_N^0 \rangle \right) = r^{-\tau} e^{-\frac{r}{\xi}}$$

Aqui não existe uma interpretação para  $\xi$  como no caso clássico. Não podemos falar na formação de domínios magnéticos. Apesar disso,  $\xi$  continua determinando uma escala absoluta para o problema (associada, neste caso, à ordem magnética). Se olharmos para uma quantidade física diferente, podemos definir um comprimento de correlação associado a esta quantidade.

Quando falamos dos efeitos de tamanho, colocamos que o comprimento de correlação do sistema termodinâmico estaria associado à forma como os sistemas finitos *escalam*. Da nossa definição fica claro que isso é verdade. Por exemplo: se pudermos dizer se para a energia por spin do estado fundamental de um sistema *escala* como:

$$\begin{aligned} \epsilon_0^N &= \frac{1}{N} \langle \psi^0 | H^N | \psi^0 \rangle \\ g_N^{\psi^0} &= \epsilon_0^\infty - \epsilon_0^N = N^{-\tau} e^{-\frac{N}{\xi}} \text{ (onde } N \text{ é o número de spins da cadeia)} \end{aligned} \quad (1.4)$$

podemos, em analogia com as expressões anteriores, tentar associar  $\frac{1}{\xi}$  com o comprimento de correlação do sistema termodinâmico. Note que  $g_N^{\psi^0}$  e  $g_{i(i+r)}^{\psi^0}$  não são funções usuais. Elas têm como domínio o espaço das hamiltonianas finitas do problema. Todo esse *malabarismo* se deve a tentar evitar trabalhar com a cadeia infinita, que apesar de estar bem definida, traz sempre um certo desconforto matemático.

O que fica claro na nossa discussão é que não existe uma definição canônica para quantidades como o comprimento de correlação. Ele é apenas um artifício para entendermos melhor o sistema estatístico.

### 1.3.3 Efeitos de Tamanho em Sistema Hamiltonianos

Efeitos de tamanho são usualmente descritos por Finite-Size-Scaling (FSS). A hipótese básica de FSS é que todas as variáveis relevantes para a descrição de um sistema finito podem ser *escaladas* quando estamos próximos da temperatura crítica do sistema termodinâmico. O artigo de revisão [5] é a referência básica do tema.

Em primeiro lugar, se estamos longe da temperatura crítica, a termodinâmica nos sugere que a energia livre do sistema seja escrita como:

$$\begin{aligned} F(T, N, V) &= V f_{\infty}(T, \frac{N}{V}) + A f^s(T, \frac{N}{V}) + o(A), \\ f_{\infty}(T, \frac{N}{V}) &= \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty}} \frac{F(T, N, V)}{V}, \end{aligned} \quad (1.5)$$

onde  $A$  é a área da superfície e  $f^s$  a energia livre superficial.

Uma grande variedade de cálculos ([13], [3], [2] e [4]) sugere que, com condições periódicas, os termos de correção de tamanho finito sejam exponencialmente decrescentes no volume:

$$F(T, N, V) = V f_{\infty} + O(e^{-\frac{V}{\xi}}).$$

À medida que nos aproximamos da temperatura crítica, 1.5 deixa de ser válida. A hipótese de escala neste caso, para um sistema com dimensão finita é que o seu comportamento é determinado pela variável *escalada*:

$$y = \frac{L}{\xi(T)}, \quad T = T_C,$$

onde  $\xi(T)$  é o comprimento de correlação do sistema termodinâmico e  $L$  é o comprimento do sistema finito. Isto implica que para a temperatura crítica, o comprimento de correlação do sistema finito tem um comportamento muito simples em relação ao tamanho.

$$\xi_L \sim L$$

O resultado mais significativo do método de FSS é que a maneira que uma quantidade termodinâmica varia com o tamanho do sistema é determinada pelos expoentes críticos do sistema termodinâmico. Mais do que isso, encontra-se um conjunto de relações entre estes expoentes. Invertendo o raciocínio, isso forma a base do método de FSS para se determinar os expoentes críticos de uma teoria.

Na década de 70 criou-se a idéia de renormalização em espaço real para justificar a hipótese de escala. Sugerimos, ao leitor interessado, a referência [32] para uma primeira leitura e posteriormente o livro [16]. A derivação da hipótese de escala por grupo de renormalização também é apresentada de forma sucinta em [5].

Toda essa discussão se generaliza para qualquer quantidade física de sistemas clássicos. Por outro lado, se lembrarmos que um sistema clássico à temperatura  $T$  e dimensão  $D$  é equivalente à um sistema quântico a temperatura zero e dimensão  $D-1$  [20], poderemos transportar as idéias de *finite-size-scaling* para o estudo de sistemas quânticos. No caso da cadeia XXZ, o sistema clássico correspondente é o modelo de 6-vértices [6]. Definindo que  $T$  é a matriz de transferência entre colunas no modelo de 6-vértices, temos que a hamiltoniana XXZ,  $H$ , é a derivada logarítmica de  $T$  com respeito ao parâmetro espectral  $u$ . Isto implica que  $T$  comuta com  $H$ , ou seja, as duas matrizes tem o mesmo espectro de autovetores:

$$H = -T_N^{-1}(0) \frac{d}{du} T_N(u) \Big|_{u=0} .$$

O comprimento de correlação de um sistema clássico de rede, pode ser definido a

partir dos dois maiores autovalores distintos da matriz de transferência,  $\lambda_0$  e  $\lambda$ :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \xi_{6\text{-vértices}}^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\ln \left( \frac{\lambda^N}{\lambda_0^N} \right)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\ln(\lambda^N) - \ln(\lambda_0^N)}, \quad (1.6)$$

onde  $N^2$  é o número de sítios do sistema finito.

A conexão entre a função de correlação de um modelo estatístico de dimensão 2 e a função de correlação de uma cadeia de spins quânticos é discutida em [24], onde os autores mostram que estas duas quantidades são equivalentes. Podemos assim supor que:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \xi_{6\text{-vértices}}^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \xi_{XXZ}^N.$$

Já que  $T$  é a derivada logarítmica de  $H$ , é usual na literatura encontrarmos que o comprimento de correlação da cadeia  $XXZ$  é dado por:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \xi_{XXZ}^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{E^N - E_0^N}. \quad (1.7)$$

Isto está de acordo com as idéias discutidas em [20], sendo amplamente acreditado.

É importante ressaltarmos que mesmo a expressão 1.6, não é um teorema. Como demonstrado em [18] ela não corresponde ao comprimento de correlação do modelo de 8-vértices no limite de desacoplamento. Contudo, em nosso caso de interesse, ela se mostrará correta.

Se considerarmos que a densidade de energia livre do modelo de 6-vértices ( sistema clássico) depende exponencialmente do volume do sistema ( ou seja do número de sítios -  $N^2$ ), esperamos que a energia por spin do estado fundamental longe do ponto isotrópico ( que corresponde ao ponto crítico ) também apresente esta dependência exponencial:

$$\epsilon_0^N = \epsilon_0^\infty + O(e^{-\frac{N}{\xi}})$$

Essas idéias são confirmadas em [31] por de Vega e Woynarovich, que, usando o

ansatz de Bethe, acharam expressões analíticas para o estado fundamental e o estado do gap de massa (veja próximo parágrafo) na região não crítica ( $0 < \alpha < 1$ ).

Definindo que:

$$\begin{aligned} \cosh(\gamma) &= -\Delta = \frac{1}{\alpha} \\ &\text{e} \\ k_1 &= 4e^{-\gamma} \prod_{n=0}^{\infty} \left( \frac{1 + e^{-2\gamma(2n+2)}}{1 + e^{-2\gamma(2n+1)}} \right)^4. \end{aligned}$$

Eles encontraram para o estado fundamental:

$$\epsilon_0^N = \epsilon_0^\infty - \frac{\sqrt{8\kappa}}{\pi^{\frac{3}{2}}} \sinh(\gamma) \frac{k_1^{\frac{N}{2}}}{N^{\frac{3}{2}}} \left[ 1 + \frac{3}{4N} \frac{1+k_1^2}{1-k_1^2} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right], \quad (1.8)$$

e para o estado do gap de massa:

$$\epsilon_1^N = \epsilon_0^\infty + \frac{\sqrt{8\kappa}}{\pi^{\frac{3}{2}}} \sinh(\gamma) \frac{k_1^{\frac{N}{2}}}{N^{\frac{3}{2}}} \left[ 1 + \frac{3}{4N} \frac{1+k_1^2}{1-k_1^2} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right], \text{ já que } \epsilon_1^\infty = \epsilon_0^\infty. \quad (1.9)$$

Observe que, em primeira ordem, a dependência exponencial se manifesta através de  $k_1$ . Isto fica mais claro no trabalho de Bórfel e Meißner [8], que encontraram duas expressões assintóticas para a energia por spin do estado fundamental.

$$\epsilon_0^N = \epsilon_0^\infty + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left( 2e^{-\frac{\gamma}{2}} \right)^N N^{-\frac{3}{2}} \{1 + \text{termos de ordem superior em } N\}$$

, quando  $\gamma \rightarrow \infty$  (ou seja, o limite de Ising,  $\Delta \rightarrow -\infty$  ou  $\alpha \rightarrow 0$ ),

$$\epsilon_0^N = \epsilon_0^\infty + 4\sqrt{2\pi} e^{-\frac{\pi^2}{\gamma}} N^{-\frac{3}{2}} \{1 + \gamma + \text{termos de ordem superior em } N\}$$

, quando  $\gamma \rightarrow 0$  (ou seja o limite isotrópico,  $\Delta \rightarrow -1$  ou  $\alpha \rightarrow 1$ ).

Algumas suposições não triviais foram introduzidas na derivação dessas expressões. Contudo estas equações estão em perfeita concordância com as idéias de FSS. Ainda mais se observarmos que o comprimento de correlação do modelo de 6-vértices, como derivado por Baxter [6, veja pgina 155] e Johnson-Krinsky-McCoy[18] é a metade do coeficiente da correção exponencial.

$$\frac{1}{\xi} = -\ln \left[ 2e^{-\frac{\gamma}{2}} \prod_{n=0}^{\infty} \left( \frac{1 + e^{-2\gamma(2n+2)}}{1 + e^{-2\gamma(2n+1)}} \right)^2 \right] = -\frac{1}{2} \ln [k_1],$$

ou equivalentemente,

$$\frac{1}{\xi} \approx 8e^{-\frac{\pi^2}{2\gamma}}, \text{ no limite de } \gamma \rightarrow 0.$$

Apesar desses resultados já serem bem conhecidos, inclusive citado em [31], a ligação de  $k_1$  com o comprimento de correlação da cadeia termodinâmica não foi colocada no trabalho de de Vega e Woynarovich de forma explícita.

$$\epsilon_0^N = \epsilon_0^\infty - \frac{\sqrt{8\kappa}}{\pi^{\frac{3}{2}}} \sinh(\gamma) \frac{e^{-\frac{2N}{\xi}}}{N^{\frac{3}{2}}} \left[ 1 + \frac{3}{4N} \frac{1 + e^{-\frac{8}{\xi}}}{1 - e^{\frac{8}{\xi}}} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right],$$

$$\epsilon_1^N = \epsilon_0^\infty + \frac{\sqrt{8\kappa}}{\pi^{\frac{3}{2}}} \sinh(\gamma) \frac{e^{-\frac{2N}{\xi}}}{N^{\frac{3}{2}}} \left[ 1 + \frac{3}{4N} \frac{1 + e^{-\frac{8}{\xi}}}{1 - e^{\frac{8}{\xi}}} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \right].$$

Ou nas expressões de Börfel e Meißner:

$$\epsilon_0^N = \epsilon_0^\infty + \sqrt{2\pi} \frac{\xi^2}{16} N^{-\frac{3}{2}} \{1 + \gamma + \text{termos de ordem superior em } N\}.$$

O caso isotrópico tem um comportamento muito diferente do que o apresentado pela região não crítica. Podemos levar o problema da cadeia XXX (via estados coerentes) no modelo sigma não linear [15]. Neste caso, as funções relevantes do problema *escalam* como uma potência do tamanho. Isso foi explorado por Woynarovich e Eckle em [33].

Neste trabalho eles encontraram que, para o estado fundamental, o gap de massa e o gap da onda de spin (veja próximo parágrafo), as leis de *escala* são puramente potências com correções logarítmicas de ordem superior:

$$\epsilon_0^N = \epsilon_0^\infty - \frac{(2\pi)^2}{48N^2} \left( 1 + \frac{0,3433}{(\ln N)^3} + O\left(\frac{\ln(\ln N)}{(\ln N)^4}, \frac{1}{(\ln N)^4}\right) \right), \quad (1.10)$$

$$\epsilon_1^N = \epsilon_2^N = \epsilon_0^\infty + \frac{(2\pi)^2}{8N^2} \left( \frac{5}{6} - \frac{1}{2 \ln N} + O\left(\frac{\ln(\ln N)}{(\ln N)^2}, \frac{1}{(\ln N)^2}\right) \right). \quad (1.11)$$

Note que isto implica que no ponto isotrópico  $N(\epsilon_2^N - \epsilon_0^N)$  será em primeira ordem uma potência de  $N$ .

Dessa forma, fica claro que o caso isotrópico ( $\alpha = 1$ ) corresponde à temperatura crítica do modelo de 6-vértices. Do ponto de vista da cadeia XXZ, o ponto isotrópico é quando a ordem de longo alcance deixa de existir, correspondendo a uma transição de fases quânticas (como definida anteriormente).

Como estamos interessados em estudar os efeitos de tamanho em primeira ordem no regime não crítico, vamos supor o *ansatz*, de que qualquer quantidade física *escala*, em primeira ordem, pela forma:

$$A_0^N = A_0^\infty + \varepsilon N^{-\tau} e^{-\frac{N}{\zeta}},$$

para  $N$  suficientemente grande.

### 1.3.4 O que vamos estudar na cadeia XXZ antiferromagnética?

É importante definirmos quais as quantidades físicas que são interessantes para estudarmos na segunda parte desse trabalho. Nosso interesse é estudar a cadeia XXZ antiferromagnética.

O estado fundamental é interessante por si só. É o estado de maior peso na estatística de sistemas à baixa temperatura e é o estado do sistema no caso particular de temperatura nula. Seguindo a notação usual da literatura, vamos denotar este estado pelo sub-índice 0. Assim, a energia por spin no estado fundamental será  $\epsilon_0^N$  para a cadeia com  $N$  sítios.

O primeiro estado excitado da cadeia XXZ é conhecido como estado do gap de massa (em analogia com as teorias de campo). O gap de massa é a diferença *escalada* da energia desse estado com a energia do estado fundamental. Na fase ordenada (a que estamos trabalhando) o gap é nulo no limite termodinâmico. Denotaremos este estado pelo sub-índice 1, assim a energia por spin no estado do gap de massa será  $\epsilon_1^N$  e o gap de massa  $G_1^N = N(\epsilon_1^N - \epsilon_0^N)$ .

O estado de mais baixa energia por spin do multipletto de  $S^z = 1$  é conhecido como estado da onda de spin antiferromagnética. Na cadeia termodinâmica o gap da onda de spin (SWG) separa o contínuo de excitações do estado fundamental. O parâmetro de anisotropia  $\alpha$  é o análogo da temperatura em um sistema estatístico clássico. No ponto crítico quântico  $\alpha = 1$ , o SWG é nulo no limite termodinâmico e passamos do análogo de uma teoria de campo massiva para uma teoria de campo renormalizável. Nesse ponto não há ordem magnética de longo alcance na cadeia termodinâmica. É usual na literatura se definir o comprimento de correlação do modelo XXZ como sendo igual ao inverso do gap da onda de spin em analogia ao comprimento de correlação do modelo de 6-vértices (veja parágrafo anterior). Além disso, ao aplicarmos um campo magnético a cadeia, os autovalores da hamiltoniana são modificados de acordo com a sua componente de momento angular  $S_z$ . O valor do gap está intimamente ligado ao campo crítico, a partir

do qual o estado fundamental passa a ser o estado da onda de spin (veja a equação 2.13). Estas são então as motivações para o estudo do estado da onda de spin e o SWG. Denotaremos este estado pelo sub-índice 2. Assim, a energia por spin no estado da onda de spin será  $\epsilon_2^N$  e o SWG  $G_2^N = N(\epsilon_2^N - \epsilon_0^N)$ .

Com o objetivo de comparar nossas idéias e cálculos com resultados analíticos, também vamos estudar o estado da onda de spin ferromagnética. Este estado pertence ao multiplete de  $S^z = N - 1$ . Denotaremos este estado pelo sub-índice f.

	Função de Onda	Energia
Estado Fundamental de $S^z=0$	$\psi_0^N$	$\epsilon_0^N$
Primeiro Estado Excitado de $S^z=0$	$\psi_1^N$	$\epsilon_1^N$
Estado Fundamental de $S^z=1$	$\psi_2^N$	$\epsilon_2^N$
Estado de $S^z = N - 1$	$\psi_f^N$	$\epsilon_f^N$

# Capítulo 2

## Ansatz de Bethe

### 2.1 Formulação do Ansatz

#### 2.1.1 Hipótese de Bethe

Incorporando a constante de acoplamento  $J$  ao hamiltoniano e escrevendo-o:

$$H = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{1}{2} [\alpha (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + S_i^z S_{i+1}^z] + h S_i^z \right\}, \quad (2.1)$$

na base de  $S^z = \sum_{i=1}^N S_i^z$ , ele é quebrado em blocos de mesma componente de momento angular (  $H$  comuta com  $S^z$  ). Nosso problema se reduz a diagonalizar cada um desses blocos.

Um estado,  $|\Psi\rangle$ , com momento angular  $S^z = \frac{N}{2} - m$ , tem como função de onda a superposição de exponenciais da forma:  $\sum_P A_P \text{Exp}[i \sum_{j=1}^m k_{P_j} x_j]$ ,

$$|\Psi_m\rangle = \sum_{x_1 < x_2 < \dots < x_m} a(x_1, x_2, \dots, x_m) |x_1, x_2, \dots, x_m\rangle, \quad (2.2)$$

onde  $k_1, k_2, \dots, k_m$  é um conjunto de números complexos e  $P$  é uma permutação dos  $m$  sítios  $x_j$ . Ou seja, o ket  $|\Psi_m\rangle$  será dado por: com a soma sendo tomada sobre todos os

arranjos de  $m$  índices sobre  $N$  sítios e  $a(x)$  é dado por (??).<sup>1</sup>

Devemos ressaltar que os kets  $|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle$  são linearmente independentes ( são autokets de  $S^z$  ) e de número  $2^N$ , que é a dimensão do espaço de Hilbert de  $H$ . Por isso formam uma base completa deste espaço. Para esclarecermos exatamente o que implica a proposição 1, construímos 2 exemplos,  $S^z = \frac{2}{2} - 1 = 0$  e  $S^z = \frac{4}{2} - 2 = 0$ .

*Exemplo 1:*  $N=2, m=1$

- $|\Psi_1\rangle = A \exp[ik]|1\rangle + A \exp[2ik]|2\rangle$

*Exemplo 2:*  $N=4, m=2$

- $|\Psi_2\rangle = \sum_P \{A_1 \exp[i(k_1 x_1 + k_2 x_2)] + A_2 \exp[i(k_1 x_2 + k_2 x_1)]\} |x_1 x_2\rangle$ , onde  $P$  são todas as combinações de  $x_1 = x_2$  dentro do conjunto  $\{1,2,3,4\}$ .

Como vemos o número total de kets que podemos construir desta forma depende de quantos conjuntos  $\{k_i\}$  independentes podemos formar para dados  $(N, m)$ .

## 2.1.2 Equações do Ansatz

Antes de prosseguirmos na identificação das amplitudes  $a(x_1, x_2, \dots, x_m)$ , devemos reescrever o hamiltoniano em termo dos operadores de levantamento e abaixamento da álgebra.

$$H = -\frac{N}{2} - \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2} [\alpha (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i-1}^+) + S_i^z S_{i-1}^z - 1] + h S_i^z \right\} \quad (2.3)$$

Para escrevermos a equação de Schrödinger independente do tempo de nosso problema, vamos aplicar a  $H$  um ket arbitrário  $|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle^2$ .

<sup>1</sup> $|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle$  denotando que os spins localizados nas posições  $x_1, x_2, \dots, x_m$  estão invertidos.

<sup>2</sup>Lembrando que:

$$e^+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } e^- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle = e^- \otimes \dots \otimes e_1^- \otimes \dots \otimes e_m^- \otimes \dots \otimes e^+$$

$$S^\pm e^\pm = 0$$

$$S^\pm e^\mp = 2e^\pm$$

$$\begin{aligned}
H|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle &= -\frac{N}{2}|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle + N_a|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle + h(N - N_a)|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle \\
&\quad -\alpha \sum_{x'_1, \dots, x'_m} |x'_1, x'_2, \dots, x'_m\rangle,
\end{aligned}$$

onde  $N_a$  é o número de vizinhos antiparalelos e  $\{x'_1, x'_2, \dots, x'_m\}$  difere de  $\{x_1, x_2, \dots, x_m\}$  por uma troca de spins entre vizinhos, ou seja:

$$|x_1, \dots, x_i, \dots, x_m\rangle \rightarrow |x_1, \dots, x_{i+1}, \dots, x_m\rangle.$$

Usando a hipótese de Bethe temos:

$$H|\Psi_m\rangle = E_m|\Psi_m\rangle$$

$$\sum_{x_1 < \dots < x_m} \left\{ \begin{aligned} & \left[ \left( -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) \right) + N_a \right] a(x_1 \dots x_m) |x_1 \dots x_m\rangle \\ & - \alpha \sum_{x'_1 < \dots < x'_m} a(x'_1 \dots x'_m) |x'_1 \dots x'_m\rangle \end{aligned} \right\} = \\
& \sum_{x_1 < \dots < x_m} E_m a(x_1 \dots x_m) |x_1 \dots x_m\rangle.$$

Se usarmos que  $N_a = \sum_{x'_1 < \dots < x'_m} 1$  e que a soma é tomada sobre todos os arranjos possíveis de  $m$  elementos, devemos reescrever a última expressão como:

$$\sum_{x_1 < \dots < x_m} \left\{ \left( -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1 \dots x_m) + \sum_{x'_1 < \dots < x'_m} [a(x_1 \dots x_m) - \alpha a(x'_1 \dots x'_m)] \right\}$$

---


$$S^z e^\pm = \pm e^\pm$$

$$\frac{1}{2}(S_i^- S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \begin{pmatrix} e^\pm \otimes e^\pm \\ e^\pm \otimes e^\mp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ e^\mp \otimes e^\pm \end{pmatrix}$$

$$[\frac{1}{2}(S_i^z S_{i+1}^z - I) + h S_i^z] \begin{pmatrix} e^\pm \otimes e^\pm \\ e^\pm \otimes e^\mp \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ e^\pm \otimes e^\mp \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \pm e^\pm \otimes e^\pm \\ \pm e^\pm \otimes e^\mp \end{pmatrix}$$

$$= \sum_{x_1 < \dots < x_m} E_m a(x_1 \dots x_m).$$

Para continuarmos a usar a hipótese de Bethe desenvolveremos casos particulares e posteriormente argumentaremos como estes resultados se generalizam.

- Caso  $m=1$

$$|\Psi\rangle = \sum_{x=1}^N a(x)|x\rangle,$$

$$H|\Psi\rangle = H \sum_{x=1}^N a(x)|x\rangle,$$

$$\sum_{x=1}^N \left\{ \left( -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - 1 \right) + N_a \right) a(x)|x\rangle - \alpha \sum_{\substack{y=x-1 \\ y=x}}^{x+1} a(x)|y\rangle \right\} = E \sum_{x=1}^N a(x)|x\rangle.$$

Como o número de vizinhos antiparalelos é sempre igual a dois ( $N_a = 2$ ), obtemos que:

$$\begin{aligned} \sum_{x=1}^N \left( -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - 1 \right) + 2 \right) a(x)|x\rangle - \alpha \sum_{x=1}^N a(x) (|x-1\rangle + |x+1\rangle) &= \\ &= E \sum_{x=1}^N a(x)|x\rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{x=1}^N \left( -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - 1 \right) + 2 \right) a(x)|x\rangle - \alpha \sum_{z=1}^N a(z+1)|z\rangle - \alpha \sum_{w=1}^N a(w-1)|w\rangle &= \\ &= E \sum_{x=1}^N a(x)|x\rangle. \end{aligned}$$

Já que  $z$  e  $w$  são índices mudos reescrevemos:

$$\sum_{x=1}^N \left\{ \left( -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - 1 \right) + 2 \right) a(x) - \alpha (a(x+1) + a(x-1)) \right\} |x\rangle = \quad (2.4)$$

$$= E \sum_{x=1}^N a(x) |x\rangle.$$

Isto vale para cada termo da somatória, logo encontramos a equação do ansatz para o caso de *um único spin invertido*:

$$\left( -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - 1 \right) + 2 \right) a(x) - \alpha (a(x+1) + a(x-1)) = E a(x).$$

- Usamos agora a forma da solução  $a(x) = A e^{ikx}$ .

$$\begin{aligned} EA &= \left( -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - 1 \right) + 2 \right) A - \alpha A e^{ik} - \alpha A e^{-ik}, \\ E &= -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - 1 \right) + 2(1 - \alpha \cos(k)). \end{aligned} \quad (2.5)$$

- Caso  $m=2$

Temos de considerar dois casos distintos, se  $x_1$  e  $x_2$  são vizinhos ou não.

a) Se  $x_2 = x_1 + 1$

O número de spins vizinhos antiparalelos ( $N_a$ ) é igual a 4 e  $\binom{x_i}{2}$  denota a combinação dos  $x_i$  2 a 2, assim:

$$E \sum_{\binom{x_i}{2}} a(x_1, x_2) |x_1, x_2\rangle = \sum_{\binom{x_i}{2}} \left\{ \begin{array}{l} \left( -\frac{N}{2} + 4 + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1, x_2) |x_1, x_2\rangle \\ -\alpha (a(x_1, x_2) |x_1 \pm 1, x_2\rangle + a(x_1, x_2) |x_1, x_2 \pm 1\rangle) \end{array} \right\}.$$

Reordenando o somatório, obtemos:

$$E \sum_{\binom{x_i}{2}} a(x_1, x_2) |x_1, x_2\rangle = \sum_{\binom{x_i}{2}} \left\{ \begin{array}{l} \left( -\frac{N}{2} + 4 + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1, x_2) \\ -\alpha (a(x_1 \pm 1, x_2) - a(x_1, x_2 \pm 1)) \end{array} \right\} |x_1, x_2\rangle.$$

Com isso encontramos a equação do Ansatz para 2 spins invertidos:

$$Ea(x_1, x_2) = \left( -\frac{N}{2} + 4 + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1, x_2) - \alpha (a(x_1 \pm 1, x_2) + a(x_1, x_2 \pm 1)). \quad (2.6)$$

Escolhendo que  $a(x_1, x_2) = \gamma e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + \eta e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1)}$ , escrevemos a energia E como:

$$E = -\frac{N}{2} + 4 + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) - 2\alpha \cos(k_1) - 2\alpha \cos(k_2).$$

b) Se  $x_2 = x_1 + 1$

O número de spins vizinhos antiparalelos neste caso é 2, assim:

$$\begin{aligned} E \sum_{\binom{x_i}{2}} a(x_1, x_1 + 1) |x_1, x_1 + 1\rangle &= \\ &= \sum_{\binom{x_i}{2}} \left\{ \begin{array}{l} \left( -\frac{N}{2} + 2 + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1, x_1 + 1) |x_1, x_1 + 1\rangle \\ -\alpha (a(x_1, x_1 + 1) |x_1 - 1, x_1 + 1\rangle + a(x_1, x_1 + 1) |x_1, x_1 + 2\rangle) \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

Reordenando a somatória, encontramos a equação do Ansatz:

$$E \sum_{\binom{x_i}{2}} a(x, x+1) |x, x+1\rangle = \sum_{\binom{x_i}{2}} \left\{ \begin{array}{l} \left( -\frac{N}{2} + 2 + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) \right) a(x, x+1) |x, x+1\rangle \\ -\alpha (a(x, x+2) |x, x+1\rangle + a(x-1, x+1) |x, x+1\rangle) \end{array} \right\},$$

$$Ea(x, x+1) = \left( -\frac{N}{2} + 2 + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) \right) a(x, x+1) - \alpha (a(x, x+2) + a(x-1, x+1)). \quad (2.7)$$

Para que as equações 2.6 e 2.7 sejam compatíveis impomos a condição extra de que:

$$2a(x, x+1) - \alpha (a(x+1, x+1) + a(x, x)) = 0.$$

Se procurarmos soluções do tipo  $a(x_1, x_2) = \gamma e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + \eta e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1)}$ , obtemos a

relação fundamental para encontrarmos os momentos  $k$ :

$$2(\gamma e^{i(k_1 x + k_2(x+1))} + \eta e^{i(k_1(x+1) + k_2 x)}) - \alpha (\gamma e^{i(k_1(x+1) + k_2(x+1))} + \eta e^{i(k_1(x+1) + k_2(x+1))}) \\ - \alpha (\gamma e^{i(k_1 x + k_2 x)} + \eta e^{i(k_1 x + k_2 x)}) = 0,$$

$$\gamma (2e^{ik_2} - \alpha e^{i(k_1 + k_2)} - \alpha) = -\eta (2e^{ik_1} - \alpha e^{i(k_1 + k_2)} - \alpha),$$

$$\frac{\gamma}{\eta} = -\frac{(2e^{ik_1} - \alpha (e^{i(k_1 + k_2)} + 1))}{(2e^{ik_2} - \alpha (e^{i(k_1 + k_2)} + 1))}.$$

Por conveniência escolhemos escrever  $\frac{\gamma}{\eta}$  como  $-e^{i\theta}$ ,

$$e^{i\theta} = -\frac{\gamma}{\eta},$$

$$\theta = -i \ln\left[\frac{\gamma}{\eta}\right],$$

$$\cot g\left[\frac{\theta}{2}\right] = i \frac{e^{i\frac{\theta}{2}} + e^{-i\frac{\theta}{2}}}{e^{i\frac{\theta}{2}} - e^{-i\frac{\theta}{2}}},$$

$$\cot g\left[\frac{\theta}{2}\right] = i \frac{-\frac{\gamma}{\eta} + 1}{-\frac{\gamma}{\eta} - 1},$$

$$\cot g\left[\frac{\theta}{2}\right] = i \frac{\gamma - \eta}{\gamma + \eta},$$

$$\cot g\left[\frac{\theta}{2}\right] = \frac{\sin\left[\frac{k_1 - k_2}{2}\right]}{\alpha \cos\left[\frac{k_1 + k_2}{2}\right] - \cos\left[\frac{k_1 - k_2}{2}\right]},$$

$$\theta = 2 * \operatorname{arccot} g\left[\frac{\sin\left[\frac{k_1 - k_2}{2}\right]}{\alpha \cos\left[\frac{k_1 + k_2}{2}\right] - \cos\left[\frac{k_1 - k_2}{2}\right]}\right].$$

- caso  $m=3$

O estudo do caso  $m=3$  possibilita generalizarmos para  $m$  arbitrário. Existem agora quatro possibilidades:

a)  $x_2 = x_1 + 1$  e  $x_3 = x_2 + 1$

$$b) x_2 = x_1 + 1 \text{ e } x_3 = x_2 + 1$$

$$c) x_2 = x_1 + 1 \text{ e } x_3 = x_2 + 1$$

$$d) x_2 = x_1 + 1 \text{ e } x_3 = x_2 + 1$$

As equações de (a) ficam da forma:

$$Ea(x_1, x_2, x_3) = \left( -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1, x_2, x_3) + 6a(x_1, x_2, x_3) \quad (2.8)$$

$$-\alpha (a(x_1 - 1, x_2, x_3) + a(x_1 + 1, x_2, x_3) + \dots + a(x_1, x_2, x_3 + 1)).$$

Pelo ansatz a solução será:

$$a(x_1, x_2, x_3) = A_{123} \exp [i (k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3)] + A_{132} \exp [i (k_1 x_1 + k_2 x_3 + k_3 x_2)] + \dots$$

$$\dots + A_{321} \exp [i (k_1 x_3 + k_2 x_2 + k_3 x_1)]$$

As amplitudes, até aqui, são arbitrárias e as energias correspondem a:

$$E = -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) + 2(1 - \alpha \cos[k_1]) + 2(1 - \alpha \cos[k_2]) + 2(1 - \alpha \cos[k_3]).$$

Por outro lado, em (b)  $x_1$  e  $x_2$  são vizinhos, logo as equações ficam da forma:

$$Ea(x_1, x_2, x_3) = \left( -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1, x_2, x_3) + 4a(x_1, x_2, x_3) \quad (2.9)$$

$$-\alpha (a(x_1 - 1, x_2, x_3) + a(x_1 + 1, x_2, x_3) + \dots + a(x_1, x_2, x_3 + 1)).$$

Já que as amplitudes do caso (a) são arbitrárias, podemos pedir para que as equações 2.8 e 2.9 sejam equivalentes. Para tanto deve valer a condição:

$$2a(x_1, x_1 + 1, x_3) = \alpha (a(x_1 + 1, x_2, x_3) + a(x_1, x_1, x_3)) \quad (2.10)$$

O que gera sobre as amplitudes as condições:

$$\frac{A_{123}}{A_{213}} = -e^{i\theta(k_1, k_2)}, \quad \frac{A_{132}}{A_{312}} = -e^{i\theta(k_1, k_2)}, \quad \frac{A_{231}}{A_{321}} = -e^{i\theta(k_2, k_3)}.$$

Condição análoga aparece no caso (c):

$$2a(x_1, x_2, x_2 + 1) = \alpha (a(x_1, x_2 + 1, x_2 + 1) + a(x_1, x_2, x_2)). \quad (2.11)$$

que gera sobre as amplitudes:

$$\frac{A_{123}}{A_{132}} = -e^{i\theta(k_2, k_3)}, \quad \frac{A_{213}}{A_{231}} = -e^{i\theta(k_1, k_3)}, \quad \frac{A_{312}}{A_{321}} = -e^{i\theta(k_1, k_2)}.$$

Em (d) temos uma pequena modificação:

$$Ea(x_1, x_2, x_3) = \left( -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1, x_2, x_3) + 2a(x_1, x_2, x_3) \quad (2.12)$$

$$- \alpha (a(x_1 - 1, x_2, x_3) + a(x_1 + 1, x_2, x_3) + \dots + a(x_1, x_2, x_3 + 1)).$$

Contudo se 2.10 e 2.11 forem satisfeitas, automaticamente 2.12 se reduz a 2.8.

Podemos agora exprimir todas as amplitudes em termos de uma, digamos  $A_{123}$ .

$$\begin{aligned} A_{213} &= -e^{i\theta(k_1, k_2)} A_{123}, \\ A_{132} &= -e^{i\theta(k_3, k_2)} A_{123}, \\ A_{312} &= -e^{i\theta(k_2, k_1)} A_{132} = e^{i\theta(k_2, k_1)} e^{i\theta(k_3, k_2)} A_{123}, \\ A_{231} &= -e^{i\theta(k_3, k_1)} A_{213} = e^{i\theta(k_3, k_1)} e^{i\theta(k_2, k_1)} A_{123}, \\ A_{321} &= -e^{i\theta(k_2, k_1)} A_{312} = e^{i\theta(k_2, k_1)} e^{i\theta(k_2, k_1)} e^{i\theta(k_3, k_2)} A_{123}. \end{aligned}$$

- caso m arbitrário

Com base no caso anterior podemos agora intuir que para o caso geral temos:

$$a(x_1, \dots, x_m) = \sum_P A_P \exp \left[ i \left( \sum_{j=1}^m k_{P_j} x_j \right) \right],$$

onde P denota as permutações de m índices. As amplitudes  $A_p$  se conectam com  $A_{12\dots m}$  através de :

$$\frac{A_p}{A_{12\dots m}} = \pm \exp \left[ i \sum \theta(k_i, k_j) \right],$$

sendo a soma em  $\theta$  sobre todos os arranjos de 2 índices e o sinal determinado pela paridade de P. A energia é dada por:

$$E = -\frac{N}{2} + 2h \left( \frac{N}{2} - m \right) + \sum_{i=1}^m 2(1 - \alpha \cos[k_i]), \quad (2.13)$$

$$\epsilon = \frac{E}{N} = -\frac{1}{2} + 2h \left( \frac{1}{2} - \frac{m}{N} \right) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^m 2(1 - \alpha \cos[k_i]) \quad (\text{energia por spin}).$$

### 2.1.3 Quantização dos momentos de Bethe

Devemos agora impor as condições de contorno para quantizar os momentos. No caso que estudamos, nos restringimos às condições periódicas de contorno, pois elas, não apresentando termo de superfície, são mais adequadas para o estudo dos efeitos de tamanho.

- Para  $m=1$ :

$$\begin{aligned} a(x) &= a(x + N), \\ Ae^{-ikx} &= Ae^{-ikx} e^{-ikN}, \\ e^{ikN} &= 1, \\ kN &= 2\pi I, \text{ onde } I \text{ é um inteiro.} \end{aligned} \quad (2.14)$$

- Para  $m=2$ :

$$\begin{aligned}
a(x_1, x_2) &= a(x_2, x_1 + N), \\
A_{12} \exp[-i(k_1 x_1 + k_2 x_2)] &= A_{21} e^{-ik_1 N} \exp[-i(k_1 x_1 + k_2 x_2)], \\
e^{-ik_1 N} &= -e^{i\theta(k_1, k_2)}, \\
Nk_1 &= 2\pi I_1 - \theta(k_1, k_2), \text{ onde } I_1 \text{ é um semi-inteiro.}
\end{aligned}$$

De forma análoga encontramos:

$$Nk_2 = 2\pi I_2 - \theta(k_2, k_1), \text{ onde } I_2 \text{ é um semi-inteiro.}$$

- Para  $m=3$  temos condições do tipo  $a(x_1, x_2, x_3) = a(x_2, x_3, x_1 + N)$ , que nos leva às equações da forma:

$$\begin{aligned}
Nk_1 &= 2\pi I_1 - \theta(k_1, k_2) - \theta(k_1, k_3), \\
Nk_2 &= 2\pi I_2 - \theta(k_2, k_1) - \theta(k_2, k_3), \\
Nk_3 &= 2\pi I_3 - \theta(k_3, k_1) - \theta(k_3, k_2), \text{ com } I_1, I_2, I_3 \text{ inteiros.}
\end{aligned}$$

- Para o caso geral obtemos as equações:

$$Nk_j = 2\pi I_j - \sum_{l=1}^m \theta(k_j, k_l), \quad j=1, \dots, m \quad (m \leq N), \quad (2.15)$$

visto que  $\theta(k_i, k_i) = 0$  e que  $I_j$  é inteiro, se  $m$  for ímpar, ou semi inteiro, se  $m$  for par.

## 2.2 Considerações sobre o Ansatz de Bethe

O hamiltoniano (2.1), quando representado em sua forma matricial, é uma matriz de dimensão  $2^N$ . Poderíamos portanto diagonalizá-lo de forma direta com algum algoritmo

computacional (tipo Lanczos). Como a dimensão da matriz cresce exponencialmente com o tamanho da cadeia, estaríamos restritos a diagonalizar sistemas da ordem de  $N=30$ [25], ou seja, construirmos uma cadeia de 30 sítios. Para alguns valores do parâmetro de anisotropia vamos ver que este tamanho é mais que suficiente. Contudo, à medida que nos aproximamos do ponto isotrópico, que tem simetria conforme e de  $SU(2)$ , veremos que estes tamanhos podem nos levar a conclusões errôneas sobre as propriedades de *escala* do problema. Com o espírito de evitar a força bruta de métodos como Lanczos, é que aparece o *ansatz* de Bethe.

Inicialmente vamos lembrar da mecânica clássica( ela é sempre um bom começo ). Quando estamos estudando pequenas oscilações em uma rede, resolvemos o problema via modos normais de vibração. Eles representam movimentos coletivos de nosso sistema de partículas. Estes modos normais tem um momento bem definido e uma interpretação muito clara. Em geral, nosso problema inicial de  $N$  graus de liberdade com  $N$  equações diferenciais acopladas se transforma em um problema algébrico de dimensão  $N$  (achar as bases de modos normais), e  $N$  equações diferenciais desacopladas. A existência de soluções está ligada à existência de  $N$  constantes de movimento (os  $N$  momentos dos modos normais [22]). Quando temos uma cadeia unidimensional infinita com acoplamento tipo oscilador harmônico de primeiros vizinhos, nossa matriz inicial, apesar de infinita, só contém termos que acoplam vizinhos, e nosso problema, que inicialmente se constituía em diagonalizar uma matriz infinita, se reduz a diagonalizar uma matriz 2 por 2.

Em matéria condensada é usual interpretarmos movimentos coletivos como pseudo-partículas. Em nosso problema podemos também definir pseudo-partículas, chamadas de ondas de spin. Semiclassicamente podemos interpretá-las quando estamos na cadeia isotrópica. Neste caso, a equação de movimento para o  $n$ -ésimo spin na representação de Heisenberg é:

$$\dot{\vec{S}}_n = \frac{i}{\hbar} (H\vec{S}_n - \vec{S}_n H)$$

Usando as relações de comutação dos operadores de spin  $\vec{S}$ , podemos reescrever esta equação na forma:

$$\hbar \vec{S}_n = (\vec{S}_n \times \vec{S}_{n+1} - \vec{S}_{n-1} \times \vec{S}_n)$$

Classicamente esta é a equação de movimento no vetor  $\vec{S}$ . Podemos linearizá-la na aproximação de  $S_n^z \sim 1$ . Tomando soluções do tipo  $S_n^x = c \sin[\omega t] e^{ink}$  e  $S_n^y = c \cos[\omega t] e^{ink}$ , temos que  $\hbar\omega = 2(1 - \cos[k])$ . Ou seja, a energia da onda de spin quando  $S_n^z \sim 1$  é:

$$E = 2(1 - \cos[k]), \quad (2.16)$$

com o spin clássico  $\vec{S}$  rodando em torno do eixo z com frequência  $\omega$ . Esta interpretação semiclássica, como foi colocada, é válida somente para o caso isotrópico. Em analogia com estas ondas clássicas, definimos a excitação elementar do nosso sistema quântico, como a inversão de um único spin em relação ao estado ferromagnético (spin-flip). Com isto o ket mais simples que podemos criar é da forma  $|x\rangle$ . Um ket  $|xy\rangle$ , por esta interpretação, corresponderia a dois spin-flip, um na posição x e outro na posição y da cadeia. Definimos com isso a onda de spin quântica como sendo:

$$|\psi\rangle = \sum_x e^{ikx} |x\rangle.$$

Este ket é a versão quântica mais próxima da nossa onda de spin clássica, já que para  $|\psi\rangle$  temos  $\frac{S_{total}^z}{N} = 1 - \frac{1}{N}$ . Identificamos k como o momento da onda. Dessa forma podemos definir ondas de spin quânticas para qualquer valor da anisotropia.

No problema quântico, temos uma matriz de dimensão  $2^N$  que desejamos diagonalizar. Como foi dito no início do capítulo, temos que na base de  $S^z$ , esta matriz se quebra em blocos de tamanho  $\binom{N}{m}$ . Vamos nos ater inicialmente aos subespaços de dimensão  $\binom{N}{1} = N$ . Temos uma analogia com o problema de pequenas oscilações de uma cadeia. Usamos, então, a mesma idéia. Existirão N momentos para N ondas de spin. Estes

momentos, como definimos no início do capítulo, serão chamados de momentos de Bethe, que interpretamos como os momentos de  $N$  pseudo-partículas. Lembrando da definição do *autoket* proposto por Bethe, vemos que as amplitudes são *moduladas* na direção da cadeia e que esta é a situação de maior  $S^z$  (exatamente como nas soluções semiclássicas que propomos):

$$|\psi\rangle = \sum_n A e^{ikn} |n\rangle.$$

Usando esse *ansatz* e aplicando as condições de contorno, encontramos os  $N$  momentos  $k$ 's que diagonalizam esse subespaço (veja o caso  $m=1$ ). É interessante notar que a expressão para as auto-energias dos estados  $|\psi\rangle$  (2.5) é a mesma que nossa energia semiclássica (2.16).

*Exemplo 1:  $N=4$ ,  $m=1$  e  $h=0$*

Nos restringindo ao subespaço gerado pelos *kets*  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$ ,  $|3\rangle$  e  $|4\rangle$ , obtemos a hamiltoniana restrita:

$$H_1 = \begin{bmatrix} 0 & -\alpha & 0 & -\alpha \\ -\alpha & 0 & -\alpha & 0 \\ 0 & -\alpha & 0 & -\alpha \\ -\alpha & 0 & -\alpha & 0 \end{bmatrix}, \text{ veja equação (2.4).}$$

O processo de diagonalização desse tipo de matriz por *ansatz* de Bethe corresponde a tentar autovetores da forma:

$$|\psi\rangle = A e^{ik} |1\rangle + A e^{2ik} |2\rangle + A e^{3ik} |3\rangle + A e^{4ik} |4\rangle.$$

É interessante notar o que acontece se nos restringimos a segunda e terceira linhas de  $H_1$ . Note que ali ainda não estão aplicadas as condições de contorno:

$$H_1 \begin{bmatrix} - \\ e^{2ik} \\ e^{3ik} \\ - \end{bmatrix} = -\alpha (e^{-ik} + e^{ik}) \begin{bmatrix} - \\ e^{2ik} \\ e^{3ik} \\ - \end{bmatrix} = -2\alpha \cos[k] \begin{bmatrix} - \\ e^{2ik} \\ e^{3ik} \\ - \end{bmatrix}, \text{ veja equação (2.5).}$$

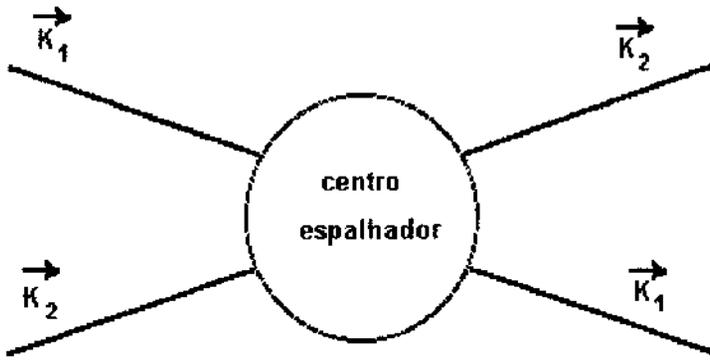
Contudo, no instante que aplicamos as condições de contorno, ou seja, olhamos para a primeira e quarta linhas de  $H_1$ , aparecem as restrições sobre os  $k$ 's.

$$H_1 \begin{bmatrix} e^{ik} \\ e^{2ik} \\ e^{3ik} \\ e^{4ik} \end{bmatrix} = -\alpha \begin{bmatrix} (e^{ik} + e^{3ik}) e^{ik} \\ (e^{-ik} + e^{ik}) e^{2ik} \\ (e^{-ik} + e^{ik}) e^{3ik} \\ (e^{-3ik} + e^{-ik}) e^{4ik} \end{bmatrix}, \text{ veja equações (2.14).}$$

Essas restrições são exatamente as mesmas das equações (2.14), já que devemos ter:

$$(e^{ik} + e^{3ik}) = (e^{-ik} + e^{ik}) \implies e^{4ik} = 1.$$

O próximo passo é tentar diagonalizar o subespaço  $\binom{N}{2} = \frac{N(N-1)}{2}$ . Ele é gerado por kets da forma  $|xy\rangle$ . A idéia de Bethe para este caso é que duas excitações elementares andam sobre a cadeia e se espalham elasticamente (veja figura 2.1). Usando a teoria de perturbação em [14], Feynman argumenta em favor dessa idéia.



espalhamento de duas ondas de spin.

Assim tínhamos inicialmente os spin-flips nos sítios  $x$  e  $y$  com momentos  $k_1$  e  $k_2$ , que se espalham elasticamente. Após o espalhamento surge uma fase  $\theta$  entre os spin-flips incidentes e emergentes:

$$\begin{aligned} \text{Onda incidente} &\rightarrow \text{Onda emergente,} \\ \sum_{xy} \exp[i(k_1x + k_2y)]|xy\rangle &\rightarrow \sum_{xy} \exp[i(k_1y + k_2x)]|xy\rangle. \end{aligned}$$

A função de onda global é então da forma:

$$|\psi\rangle = \frac{\gamma}{\eta} \sum_{xy} \left\{ \exp[i(k_1x + k_2y)] + e^{i\theta(k_1, k_2)} \exp[i(k_1y + k_2x)] \right\} |xy\rangle.$$

Novamente isto gera a dimensão do subespaço que estamos tentando diagonalizar, já que teremos a combinação de  $N$  sítios dois a dois.

*Exemplo 2:*  $N=4$ ,  $m=2$  e  $h=0$

Restringindo-nos ao subespaço gerado pelos kets  $|14\rangle$ ,  $|12\rangle$ ,  $|13\rangle$ ,  $|24\rangle$ ,  $|23\rangle$  e  $|34\rangle$ , obtemos a hamiltoniana restrita:

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\alpha & -\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\alpha & -\alpha & 0 & 0 \\ -\alpha & -\alpha & 1 & 0 & -\alpha & -\alpha \\ -\alpha & -\alpha & 0 & 1 & -\alpha & -\alpha \\ 0 & 0 & -\alpha & -\alpha & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha & -\alpha & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Tentamos autovetores da forma:

$$|\psi\rangle = \sum_P \{ \gamma \exp[i(k_1 x_1 + k_2 x_2)] + \eta \exp[i(k_1 x_2 + k_2 x_1)] \} |x_1 x_2\rangle,$$

onde P são todas as combinações de  $x_1 = x_2$  dentro do conjunto  $\{1,2,3,4\}$ .

$$|\psi\rangle = \frac{\gamma}{\eta} \left( \begin{array}{l} \{ \exp[i(k_1 + 4k_2)] + e^{i\theta(k_1, k_2)} \exp[i(4k_1 + k_2)] \} |14\rangle + \\ \{ \exp[i(k_1 + 2k_2)] + e^{i\theta(k_1, k_2)} \exp[i(2k_1 + k_2)] \} |12\rangle + \\ \{ \exp[i(k_1 + 3k_2)] + e^{i\theta(k_1, k_2)} \exp[i(3k_1 + k_2)] \} |13\rangle + \\ \{ \exp[i(2k_1 + 4k_2)] + e^{i\theta(k_1, k_2)} \exp[i(4k_1 + 2k_2)] \} |24\rangle + \\ \{ \exp[i(2k_1 + 3k_2)] + e^{i\theta(k_1, k_2)} \exp[i(3k_1 + 2k_2)] \} |23\rangle + \\ \{ \exp[i(3k_1 + 4k_2)] + e^{i\theta(k_1, k_2)} \exp[i(4k_1 + 3k_2)] \} |34\rangle + \end{array} \right).$$

Como vimos na primeira parte do capítulo,  $\gamma$  e  $\eta$  estão relacionados através da função  $\theta$  de  $k_1$  e  $k_2$ .

A generalização para os outros sub-espacos se dá de maneira natural, sempre com a idéia de colisões elásticas entre spin-flips.

A pergunta que podemos fazer agora é: quando podemos integrar um sistema por *ansatz* de Bethe? Uma condição necessária para a existência de solução desse tipo é de que possamos, de alguma forma, tornar todos os sítios da hamiltoniana equivalentes. Dentro da interpretação de pseudo-partículas, cada momento é uma integral de movimento.

Então, para um sistema de dimensão  $2^N$  devemos ter  $2^N$  dessas integrais. Um contra-exemplo muito simples é uma cadeia de Heisenberg com ligação antiferromagnética no primeiro sítio e ferromagnética nos demais. Essa cadeia não é integrável via *ansatz* de Bethe. As equações do *ansatz* ficam sobre determinadas, indicando que temos menos integrais de movimento que graus de liberdade.

Generalizações do método de Bethe foram desenvolvidas por Faddeev[11], Kulish e Sklyanin[19][21]. Em [12] é mostrado como o *ansatz* de Bethe algébrico está intimamente ligado ao método de espalhamento inverso quântico. Além de recuperar os resultados do *ansatz* de Bethe tradicional, o *ansatz* de Bethe algébrico mostra de maneira evidente que a interpretação de spin-flips, espalhando elasticamente, é correta. É muito interessante ver que, a partir de um estado de vácuo, podemos conseguir os estados de Bethe, definindo operadores de criação e aniquilação. No caso ferromagnético, o vácuo é exatamente o estado ferromagnético e as excitações fundamentais são spin-flips. O caso antiferromagnético é um pouco mais complicado, pois o vácuo físico é o estado fundamental, que a princípio já seria uma superposição de spin-flips. Contudo, uma reparametrização do problema, nos possibilita enxergar o estado de vácuo como um mar de Dirac. Dessa forma as excitações elementares do nosso problema são redefinidas e constituem um par (*spin-flip*)-buraco. Uma discussão muito interessante dessa fenomenologia se encontra em [10] ( um artigo de título muito instigante: *What is the spin of a spin wave?*). A relevância das condições de contorno para solução de sistemas finitos é discutida em [29], sendo de ótima valia para o entendimento do método.

Em [30] encontramos um curso introdutório ao *ansatz* de Bethe algébrico. Contudo para os leitores interessados, recomendamos que antes de tentar estudar essas referências, se familiarizem com as equações de Yang-Baxter e suas ligações com os vários modelos integráveis. O livro [6] é nossa indicação para uma leitura inicial e o livro [23] é um texto mais moderno que usa o modelo de Potts como motivação para o leitor. A maior parte dos artigos fundamentais sobre este assunto está reunido em [38] e [17]

Devemos ressaltar que a maior importância do *ansatz* de Bethe algébrico, juntamente

com as equações de Yang-Baxter, é a de criar classes de universalidade de problemas. Sistemas como: o modelo XXX, o modelo de Schroedinger não-linear e o modelo de Sine-Gordon, são resolvidos pelo Método de Espalhamento Inverso Clássico (MEIC), pois estão associados a uma álgebra tradicional (clássica). Já os modelos XXZ, XYZ, de 6-vértices, de 8-vértices e algumas equações de diferença podem ser resolvidos pelo Método de Espalhamento Inverso Quântico (MEIQ), estando associados a um novo tipo de álgebra, conhecida como grupos quânticos. Recomendamos como texto de revisão sobre grupos quânticos e MEIQ [9] e suas referências.

# Capítulo 3

## Efeitos de Tamanho no Modelo XXZ

### 3.1 Introdução

Na primeira parte de nosso trabalho discutimos as idéias envolvidas no estudo de efeitos de tamanho e o interesse de estudarmos o modelo XXZ. Desenvolvemos o *ansatz* de Bethe para o modelo XXZ no capítulo dois. Através dele transformamos o problema de diagonalizar uma matriz  $2^N$  em resolver um sistema de  $m$  ( $m \leq N$ ) equações não-lineares acopladas. Isto nos possibilita encontrar as autoenergias de diversos estados para cadeias da ordem de mil sítios. Podemos desta forma estudar os efeitos de tamanho nesses estados e, assim, entender melhor os conceitos discutidos no primeiro capítulo.

Usando uma estação de trabalho SUN SPARC 10 e dupla precisão padrão de C++, resolvemos numericamente as equações do *ansatz* de Bethe (2.15) para cadeias de quatro a mil sítios. Os estados que estudamos foram os discutidos no capítulo 1. A partir deles calculamos o gap de massa ( $G_1^N$ ) e o gap da onda de spin anti-ferromagnética ( $G_2^N$ ).

Usando procedimentos padrões de extrapolação numérica (veja apêndice A), estimamos o limite termodinâmico de cada uma dessas quantidades.

	Função de Onda	Energia
Estado Fundamental de $S^z=0$	$\psi_0^N$	$\epsilon_0^N$
Primeiro Estado Excitado de $S^z=0$	$\psi_1^N$	$\epsilon_1^N$
Estado Fundamental de $S^z=1$	$\psi_2^N$	$\epsilon_2^N$
Estado de $S^z = N - 1$	$\psi_f^N$	$\epsilon_f^N$

Se supusermos que estas quantidades *escalam* pela lei:

$$A^N = A^\infty + \varepsilon N^{-\tau} e^{-\frac{N}{\zeta}}.$$

Tomando três valores consecutivos da sequência  $A^N$  podemos encontrar as quantidades  $\varepsilon$ ,  $\tau$  e  $\zeta$ .

$$\begin{aligned} \ln \left[ \frac{A^N - A^\infty}{A^{N+2} - A^\infty} \right] &= -\tau \ln \left[ \frac{N}{N+2} \right] + \frac{2}{\zeta} \\ \ln \left[ \frac{A^{N+2} - A^\infty}{A^{N+4} - A^\infty} \right] &= -\tau \ln \left[ \frac{N+2}{N+4} \right] + \frac{2}{\zeta} \end{aligned}$$

É claro que  $\varepsilon$ ,  $\tau$  e  $\zeta$  são funções de  $N$ . Contudo, se considerarmos que estas quantidades variam pouco para termos consecutivos da sequência de  $A^N$ , podemos gerar sequências para  $\varepsilon$ ,  $\tau$  e  $\zeta$ . Esperamos que estas sequências tenham pontos de acumulação, já que pela filosofia do *finite-size-scaling*, estas quantidades seriam constantes no limite assintótico. Estes pontos de acumulação serão os coeficientes da lei de escala no regime assintótico.

No restante desse capítulo apresentaremos os resultados de *scaling* dos casos de interesse e no capítulo seguinte discutiremos como estes resultados se encaixam no cenário descrito no capítulo 1.

## 3.2 Estado Fundamental

Como vimos no capítulo dois, o sistema de equações que precisamos resolver tem inteiros (ou semi-inteiros), que a princípio são quaisquer. Das equações 2.14 podemos ver que estes inteiros estão ligados à escolha do ramo do logarítimo. A escolha de um conjunto desses inteiros determina a escolha do autoestado do hamiltoniano que iremos obter ao resolver as equações do *ansatz*. Para sabermos qual a escolha desses números, que determina o estado fundamental, recorreremos a resultados da diagonalização exata obtida por Orbach em [27] e Medeiros em [25]. Por inspeção nessas cadeias pequenas, podemos inferir que a escolha adequada para o estado fundamental é dada por:

$$I = 1, 3, \dots, N - 3, N - 1$$

ou

$$I = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{N-1}{2}$$

Nas figuras 3-1 e 3-2, plotamos a energia por spin do estado fundamental como função do número de sítios da cadeia e da anisotropia. Podemos ver que próximo do caso de Ising o valor do limite termodinâmico é alcançado muito mais rápido que próximo do caso isotrópico.

Apresentamos na tabela 3.2.1 os valores estimados para  $\epsilon_0^\infty$  em função da anisotropia. Para comparação colocamos na terceira coluna os valores obtidos por Yang-Yang, a partir das equações integrais do limite contínuo do *ansatz* de Bethe.

Anisotropia ( $\alpha$ )	N	$\epsilon_0^N$	$\epsilon_0^\infty$ (estimado)	$\epsilon_0^\infty$ (exato)
0,00	290	-0,2500000000000000	-0,2500000000000000	-0,2500000000000000
0,05	290	-0,250624609375153	-0,250624609375153	-0,250624609375153
0,10	290	-0,252493750039258	-0,252493750039258	-0,252493750039258
0,20	712	-0,259900010201978	-0,259900010201978	-0,259900010201978
0,30	1024	-0,271994018074520	-0,271994018074520	-0,271994018074520
0,40	1024	-0,288402772536724	-0,288402772536724	-0,288402772536724
0,50	1024	-0,308611022987933	-0,308611022987933	-0,308611022987933
0,60	1024	-0,331978286738509	-0,331978286738509	-0,331978286738509
0,70	1024	-0,357778706529868	-0,357778706529868	-0,357778706529615
0,80	994	-0,385280453702501	-0,38528045	-0,385280314887152
0,90	968	-0,413869204034176	-0,413868406	-0,413868407922578
1,00	990	-0,443148020214625	-0,4431471807	-0,443147180559945

Tabela 3.2.1 - resultados obtidos para a energia por spin do estado fundamental.

Como podemos ver na tabela 3.2.1 encontramos para  $\alpha \leq 0,6$  os valores exatos (dentro de nossa precisão numérica) para  $\epsilon_0^\infty$ . Para  $0,8 \leq \alpha \leq 1$  usamos o procedimento de extrapolação da série de Taylor. O caso 0,7 é o mais delicado, pois como sua diferença do valor exato se encontra após a nona casa decimal, nenhum procedimento de extrapolação irá melhorar o valor de  $\epsilon_0^{1024}$  (nossas operações são realizadas com 18 casas decimais e todos os procedimentos de extrapolação, em algum instante, tomam um valor ao quadrado). Os valores exatos para comparação podem ser encontrados com oito casas decimais em [26], ou em termos de uma série infinita em [36].

Como colocamos na introdução, supomos uma lei de escala da forma:

$$\epsilon_0^N = \epsilon_0^\infty + \epsilon N^{-\tau} e^{-\frac{N}{\zeta}}$$

A partir das figuras 3-3 e 3-4 podemos ver que aparentemente, só existem duas possibilidades para a correção de potência  $\tau$ . Para  $0,1 \leq \alpha \leq 0,7$ ,  $\tau$  assume um valor próximo de  $\frac{3}{2}$ . A pergunta que podemos fazer é se, quando  $\alpha = 0,8, 0,9$  e  $1$ , suas curvas não terão um comportamento similar a quando  $\alpha = 0,7$  (que sai do valor 2, passa por um mínimo e finalmente tem seu ponto de acumulação em  $\frac{3}{2}$ ). Note que na figura 3-3, à medida que nos aproximamos do ponto isotrópico, o mínimo de  $\tau$  se desloca para a direita. Isto é consistente com nossa discussão no primeiro capítulo, onde colocamos que o comprimento de correlação de um sistema termodinâmico está ligado ao comportamento de escala de sistemas finitos. Assim podemos associar a posição desses mínimos a uma indicação da ordem de grandeza do comprimento de correlação dos vários sistemas termodinâmicos. Seguindo esta idéia, já que o sistema isotrópico tem comprimento de correlação infinito,  $\tau$  deve ter o valor de 2 para todo N. Por outro lado, como os sistemas com  $\alpha = 0,8$  e  $0,9$  têm um comprimento de correlação finito, esperamos que para um N suficientemente grande,  $\tau$  passe por um mínimo e encontre o valor de  $\frac{3}{2}$ .

Na figura 3-5 apresentamos  $\frac{1}{\zeta}$  como funções de N e  $\alpha$ . A tabela 3.2.2 e a figura 3-7 colocam  $\frac{1}{\zeta}$  como função de  $\alpha$ . Usando a notação do parágrafo 1.3.3, temos que o resultado exato de [31] para  $\frac{1}{\zeta}$ :

$$\frac{1}{\zeta} = -\ln \left[ 2e^{-\frac{\gamma}{2}} \prod_{n=0}^{\infty} \left( \frac{1 + e^{-2\gamma(2n-2)}}{1 + e^{-2\gamma(2n+1)}} \right)^2 \right]$$

A tabela 3.2.2 compara nossos resultados com esses resultados analíticos. Como vemos, existe uma ótima concordância entre eles, principalmente quando nos afastamos do caso isotrópico.

O termo constante  $\varepsilon$ , apresentado na figura 3-8, tem um comportamento análogo ao de  $\tau$  e  $\frac{1}{\zeta}$ . Observe que as curvas apresentam um máximo à medida que nos deslocamos em N (exatamente como nas curvas para  $\tau$ ).

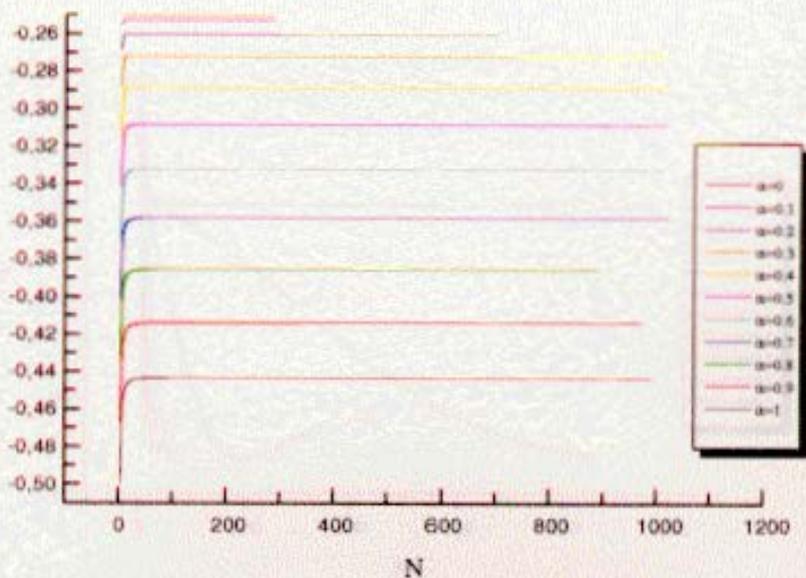


Figura 3-1: energia por spin do estado fundamental

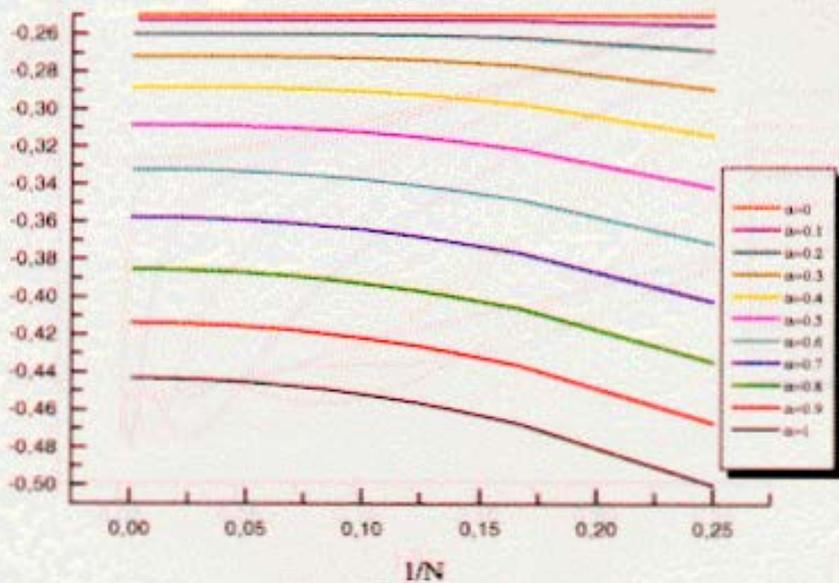


Figura 3-2: energia por spin do estado fundamental.

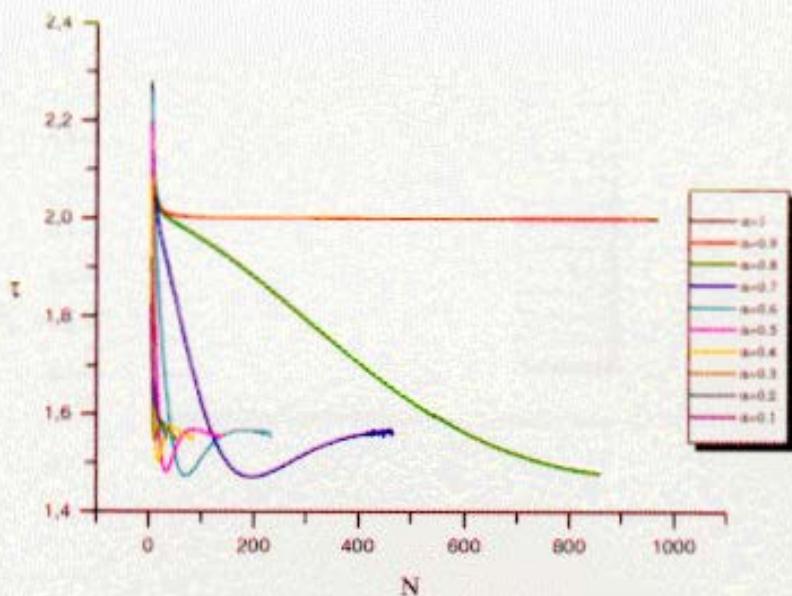


Figura 3-3: coeficiente da correção de potência para o estado fundamental.

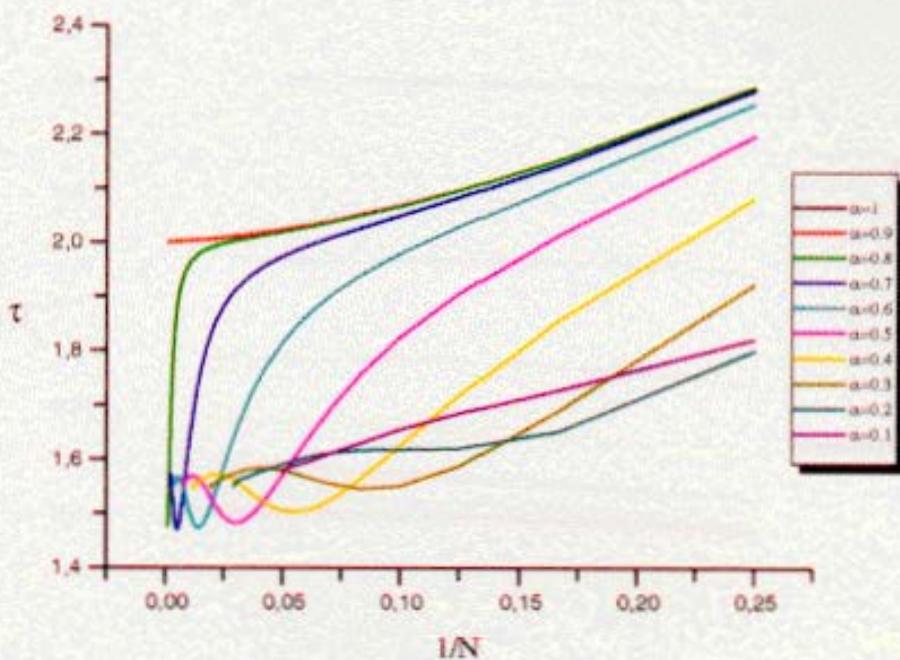


Figura 3-4: coeficiente da correção de potência para o estado fundamental.

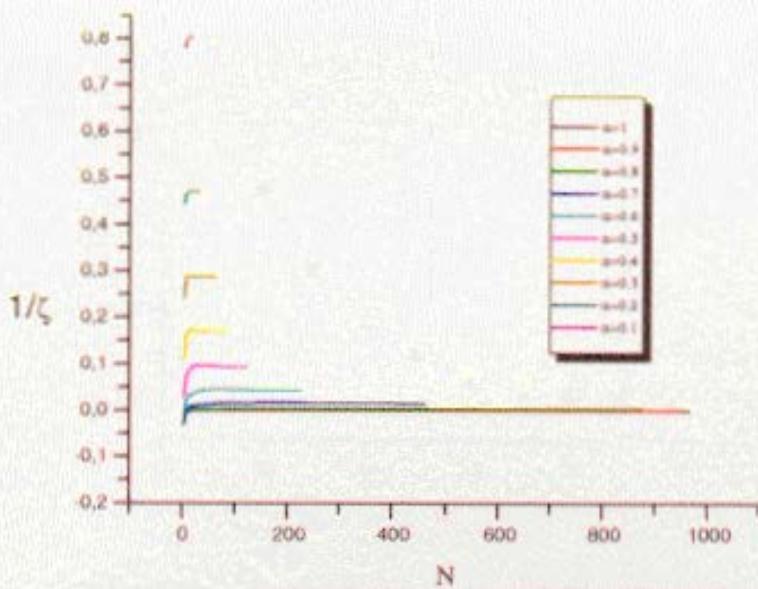


Figura 3-5: coeficiente da correção exponencial para o estado fundamental.

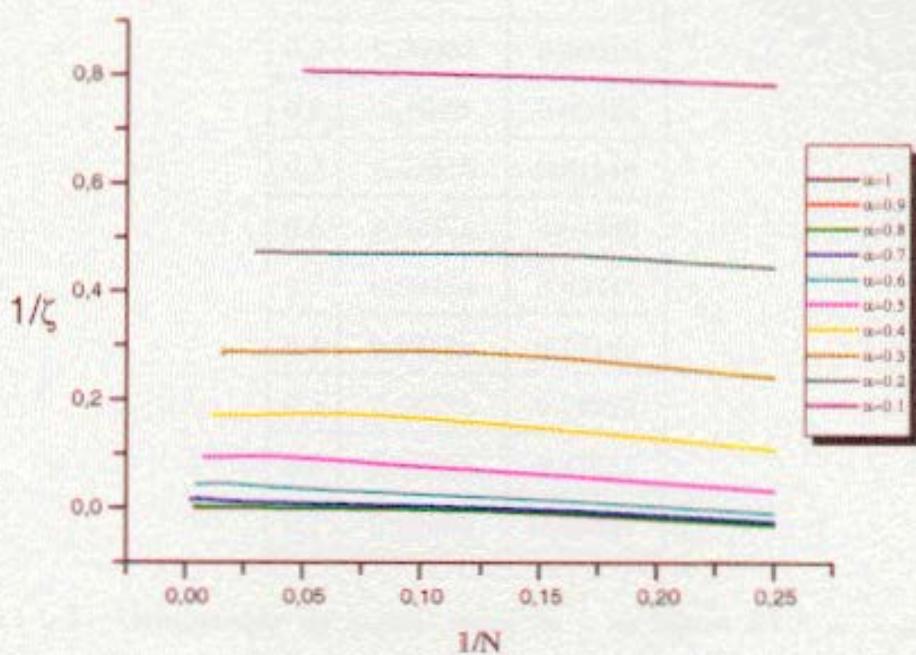


Figura 3-6: coeficiente da correção exponencial para o estado fundamental.

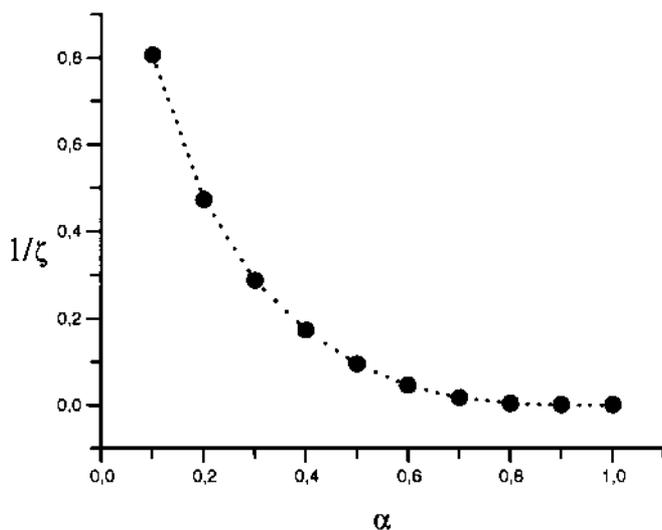


Figura 3-7: último valor da sequência do coeficiente exponencial em função da anisotropia.

$\alpha$	$\frac{1}{\zeta}$	$\frac{1}{\zeta}$ (exato)
1,0	1,5098E-7	0
0,9	0,00003	0,00010
0,8	0,0029	0,00324
0,7	0,01615	0,01618
0,6	0,04472	0,04480
0,5	0,09424	0,09441
0,4	0,17175	0,17189
0,3	0,28723	0,28928
0,2	0,47255	0,47317
0,1	0,80658	0,80847

Tabela 3.2.2 - Comparação do último valor de  $\frac{1}{\zeta}$  na figura 3-7 e o valor obtido da expressão de De Vega e Woynarovich.

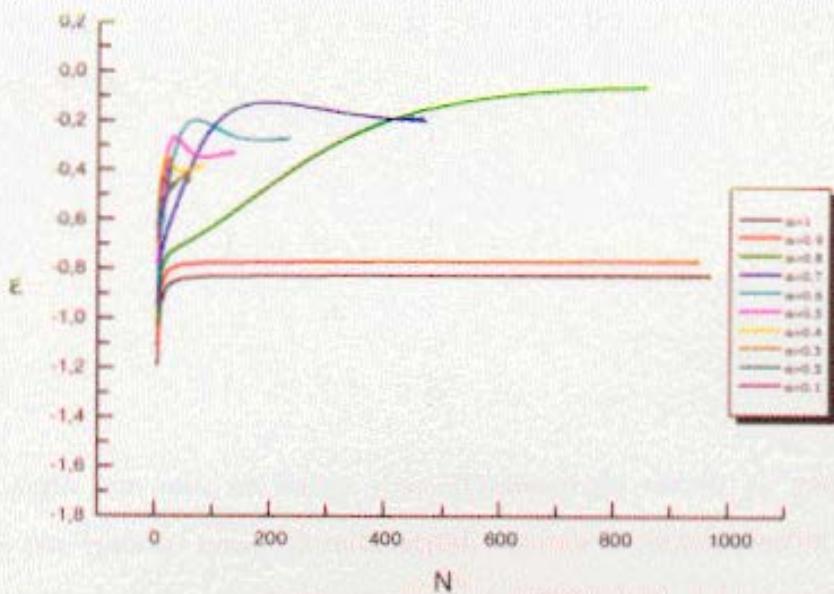


Figura 3-8: termo constante da lei de escala para o estado fundamental.

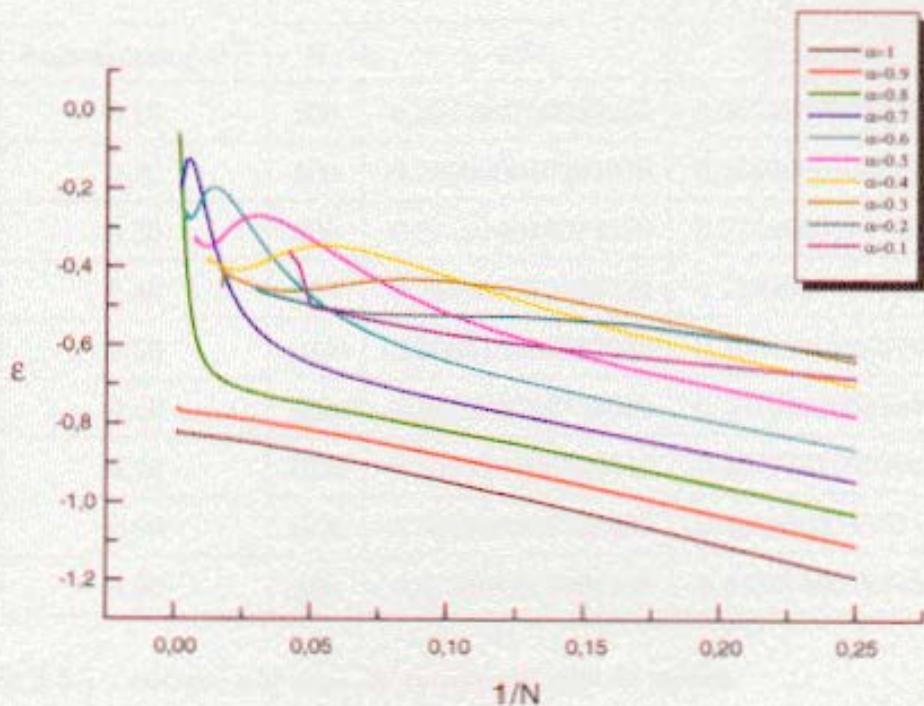


Figura 3-9 : termo constante da lei de escala para o estado fundamental.

### 3.3 Estado do Gap de Massa

Para o estado do gap de massa, descobrimos que a escolha adequada para as equações do *ansatz* seriam os conjuntos:

$$I = 0, 2, \dots, N-4, N-2$$

ou

$$I = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1$$

Como a energia por spin no limite termodinâmico do estado do gap de massa é igual a energia por spin do estado fundamental, usamos as extrapolações obtidas para o estado fundamental como os valores de  $\epsilon_1^\infty$ . Nas figuras 3-10, 3-11 e na tabela 3.3.1 é apresentada a energia por spin do estado do gap de massa em função do número de sítios  $N$  e da anisotropia  $\alpha$ .

Anisotropia ( $\alpha$ )	N	$\epsilon_1^N$	$\epsilon_1^\infty$ (exato)
0,10	500	-0,252493750039258	-0,252493750039258
0,20	500	-0,259900010201978	-0,259900010201978
0,30	500	-0,271994018074520	-0,271994018074520
0,40	868	-0,288402772536724	-0,288402772536724
0,50	1020	-0,308611022987933	-0,308611022987933
0,60	1020	-0,331978286738509	-0,331978286738509
0,70	1020	-0,357778706529345	-0,357778706529615
0,80	1020	-0,385280236148497	-0,385280314887152
0,90	968	-0,413866518592205	-0,413868407922578

Tabela 3.3.1 - energia por spin do estado do gap de massa.

Os coeficientes  $\tau$ ,  $\frac{1}{\zeta}$  e  $\varepsilon$  são apresentados nas figuras 3-12, 3-14 e 3-16. Como previsto em [31], os valores de  $\frac{1}{\zeta}$  coincidem com os encontrados para o estado fundamental (veja tabela 3.3.2). Novamente a correção de potência (de maneira mais clara que no estado fundamental) tende ao valor  $\frac{3}{2}$ , se acreditarmos que, quando  $\alpha = 0,8$  e  $0,9$ , as curvas têm o mesmo comportamento que quando  $\alpha = 0,7$  para  $N$  suficientemente grande. Pelo comportamento apresentado no estado fundamental por  $\alpha = 0,9$ , podemos intuir que o caso isotrópico tem  $\tau = 2$ . Observe que  $\varepsilon$  atinge seu limite com sinal oposto ao do estado fundamental. Isto está de acordo com as previsões de [31] e pode ser observado nas equações 1.8 e 1.9. Contudo, a maneira que este limite é alcançado é completamente diferente do comportamento do estado fundamental.

$\alpha$	$\frac{1}{\zeta}$	$\frac{1}{\zeta}$ (exato)
0,9	0,00011	0,00010
0,8	0,00301	0,00324
0,7	0,01609	0,01618
0,6	0,04470	0,04480
0,5	0,09480	0,09441
0,4	0,17167	0,17189
0,3	0,28871	0,28928
0,2	0,47187	0,47317
0,1	0,80244	0,80847

Tabela 3.3.2 - Comparação do último valor de  $\frac{1}{\zeta}$  na figura 3-14 e o valor obtido analiticamente.

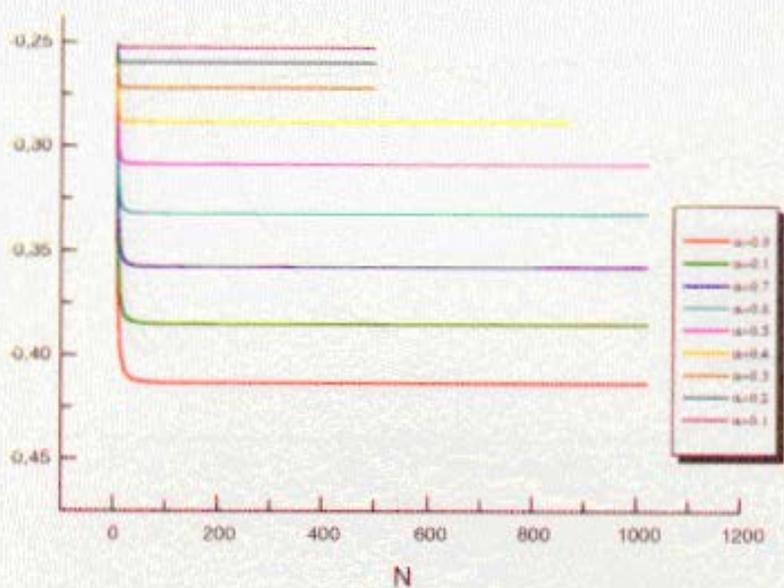


Figura 3-10: energia por spin do estado do gap de massa.

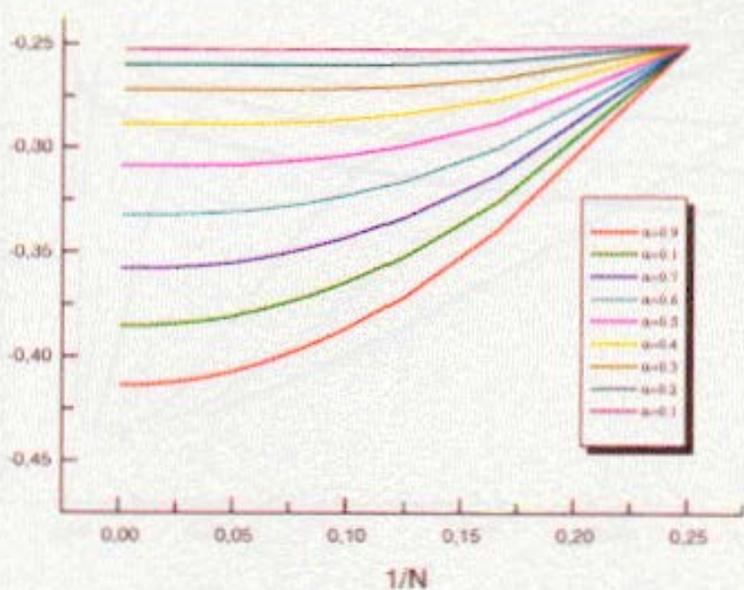


Figura 3-11: energia por spin do estado do gap de massa

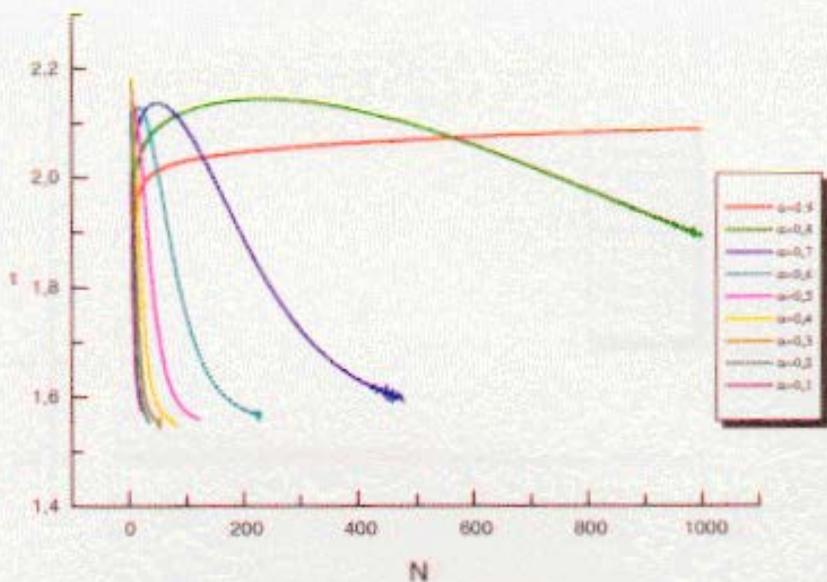


Figura 3-12: coeficiente da correção de potência para o estado do gap de massa.

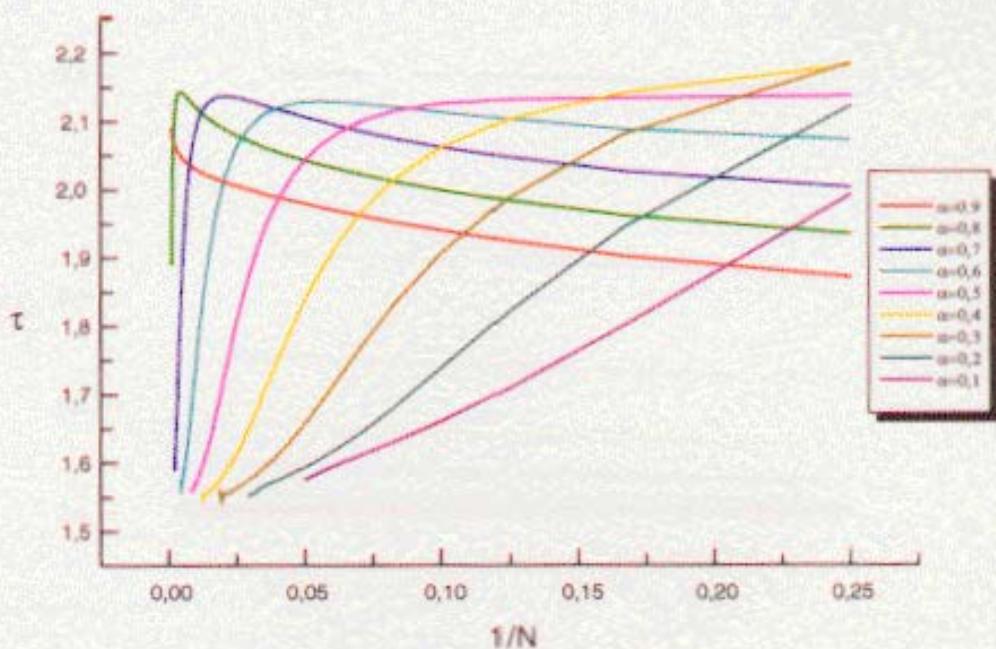


Figura 3-13: coeficiente da correção de potência para o estado do gap de massa.

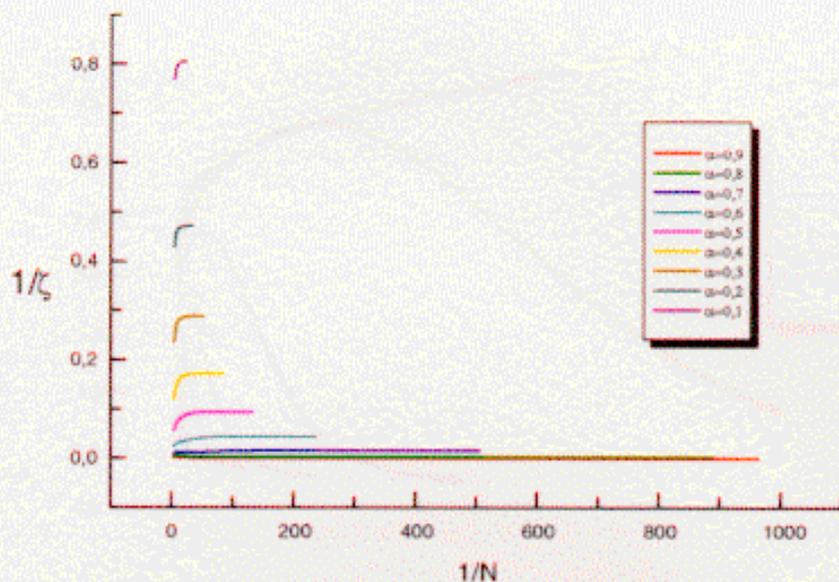


Figura 3-14: coeficiente da correção exponencial para o estado do gap de massa.

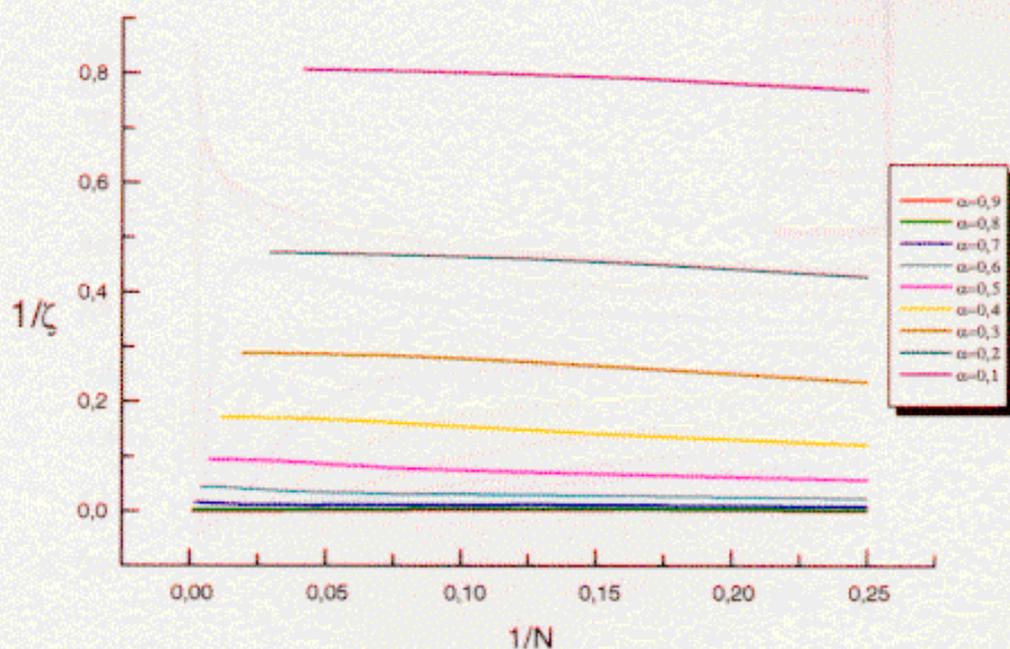


Figura 3-15: coeficiente da correção exponencial para o estado do gap de massa.

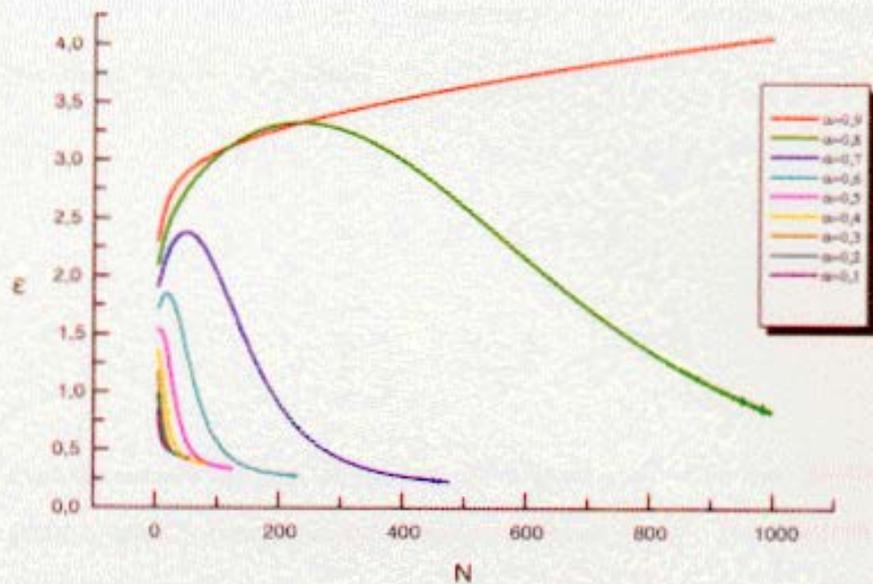


Figura 3-16: termo constante da lei de escala do estado do gap de massa

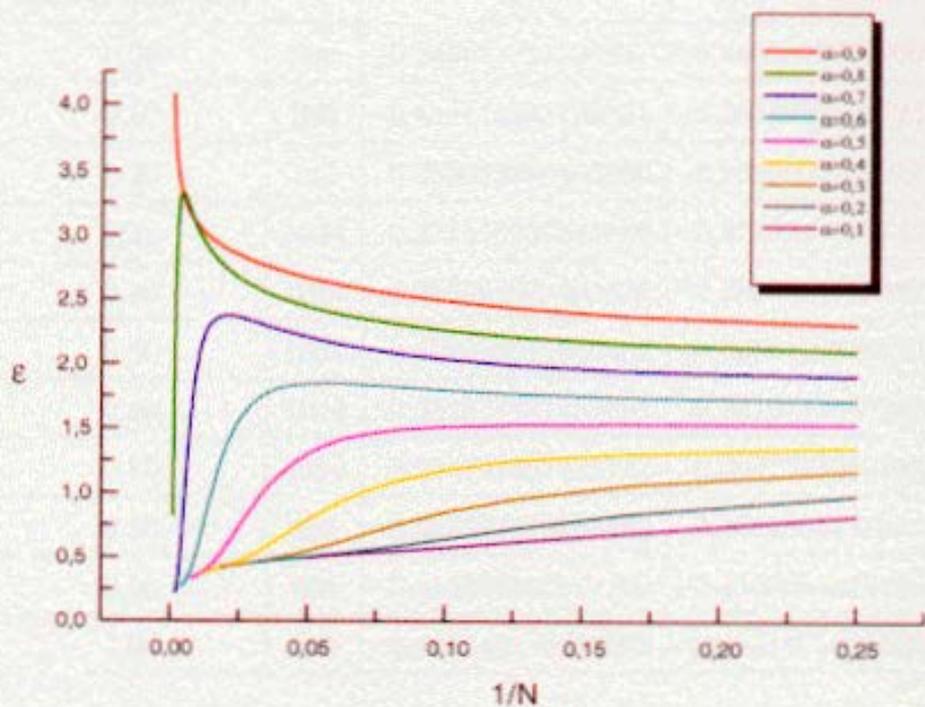


Figura 3-17: termo constante da lei de escala do estado do gap de massa.

### 3.4 Estado da Onda de Spin Antiferromagnética

Para o estado do gap da onda de spin, descobrimos que a escolha adequada para as equações do *ansatz* seriam os conjuntos:

$$I = 3, 5, \dots, N - 5, N - 3$$

ou

$$I = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots, \frac{N-3}{2}$$

Como no caso do estado do gap de massa,  $\epsilon_2^\infty$  é igual a  $\epsilon_0^\infty$ . Por isso usamos os valores extrapolados para o estado fundamental como os valores de  $\epsilon_2^\infty$ . Nas figuras 3-18, 3-19 e na tabela 3.3.1 é apresentada a energia por spin do estado da onda de spin em função do número de sítios N e da anisotropia  $\alpha$ .

Anisotropia ( $\alpha$ )	N	$\epsilon_2^N$	$\epsilon_2^\infty = \epsilon_0^\infty$ (exato)
0,00	290	-0.246551724137931	-0,2500000000000000
0,10	290	-0.249715922722821	-0,252493750039258
0,20	712	-0.259023290403060	-0,259900010201978
0,30	1024	-0.271545259841686	-0,271994018074520
0,40	1024	-0.288094985963329	-0,288402772536724
0,50	1024	-0.308420591885437	-0,308611022987933
0,60	1024	-0.331877977459891	-0,331978286738509
0,70	1024	-0.357738487422142	-0,357778706529615
0,80	894	-0.385267379887469	-0,385280314887152
0,90	968	-0.413863563077209	-0,413868407922578
1,00	990	-0.443143279332082	-0,443147180559945

Tabela 3.3.1 - energia por spin do estado da onda de spin.

Os coeficientes  $\tau$ ,  $\frac{1}{\zeta}$  e  $\varepsilon$  são apresentados nas figuras 3-20, 3-22 e 3-24. Ao contrário dos casos anteriores, o limite termodinâmico  $\frac{1}{\zeta}$  é aparentemente nulo para todos os valores de  $\alpha$ . Novamente podemos pensar se (para N suficientemente grande), quando  $\alpha = 0,8$  e  $0,9$ , as curvas têm o mesmo comportamento que quando  $\alpha = 0,7$ . Com isso a correção de potência para a região anisotrópica seria  $\tau = 1$ . O caso isotrópico teria  $\tau = 2$ .

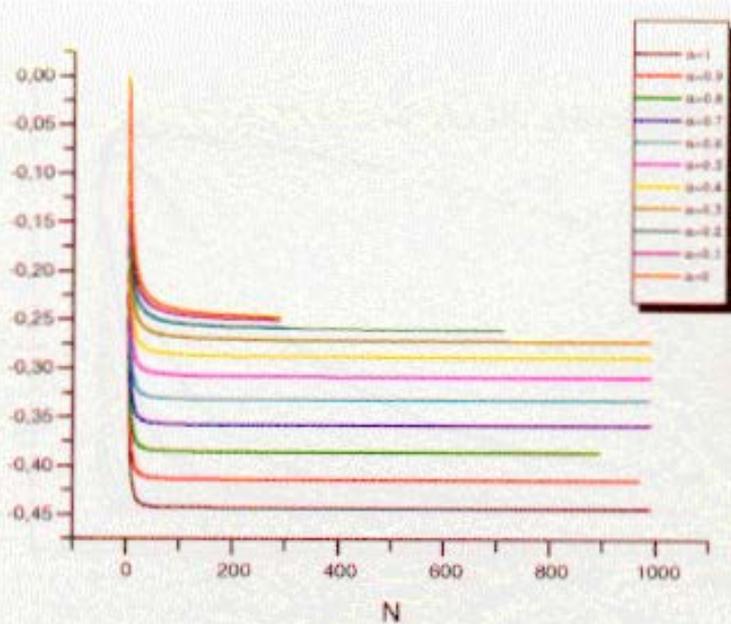


Figura 3-18: energia por spin do estado de onda de spin.

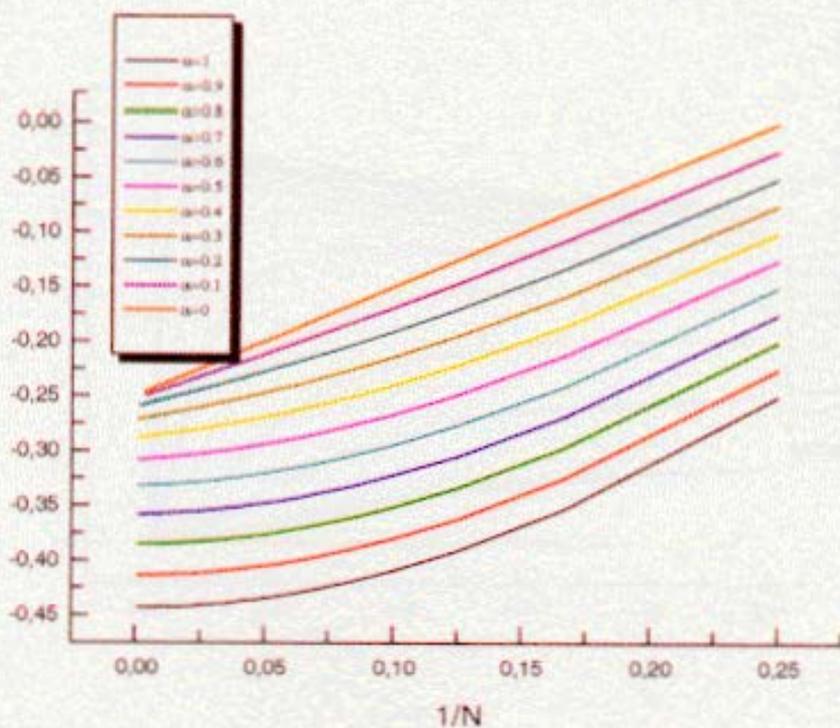


Figura 3-19: energia por spin do estado de onda de spin.

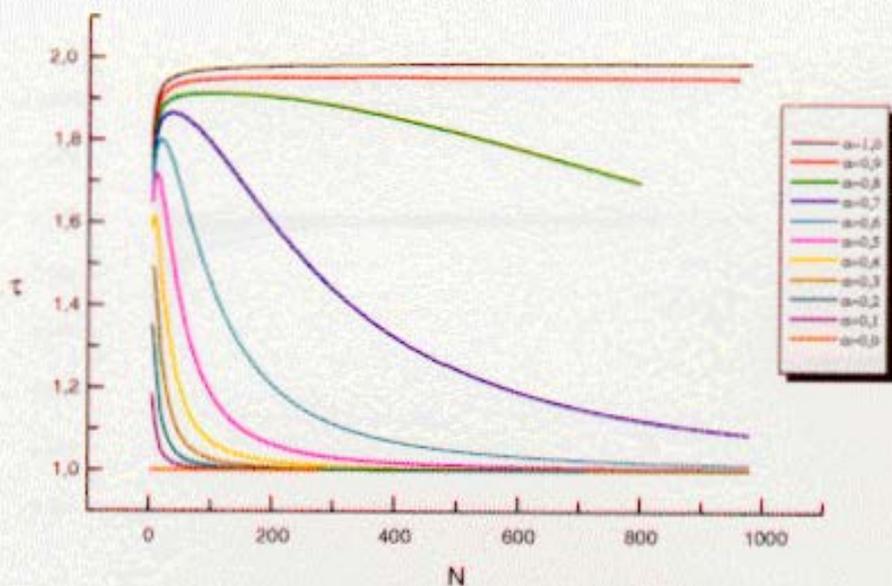


Figura 3-20: coeficiente da correção de potência para o estado de onda de spin.

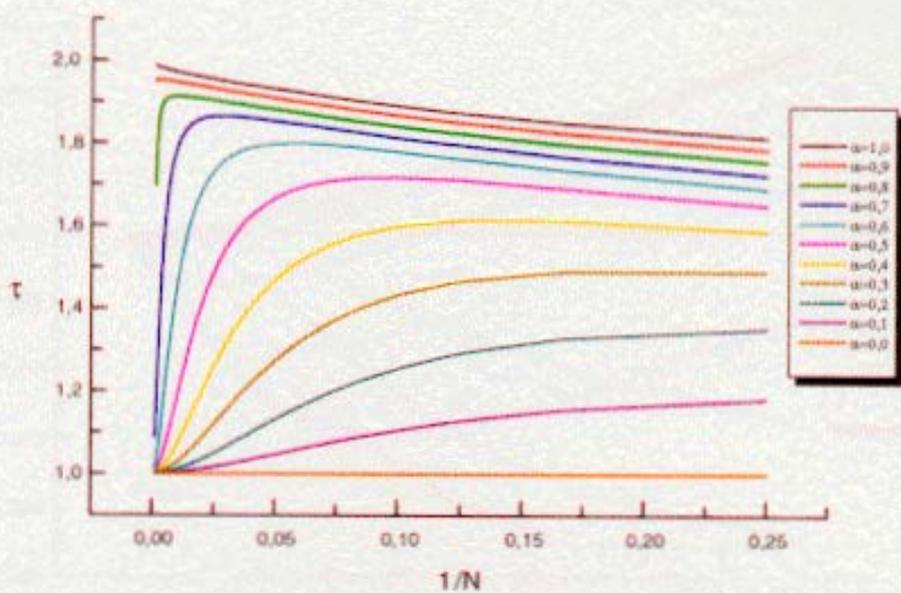


Figura 3-21: coeficiente da correção de potência para o estado de onda de spin.

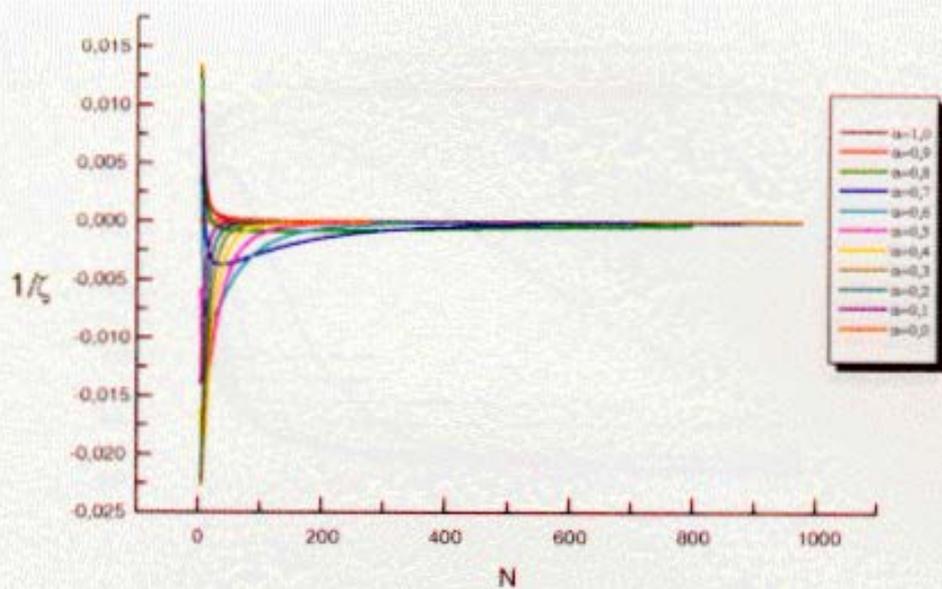


Figura 3-22a: coeficiente da correção exponencial para o estado de onda de spin.

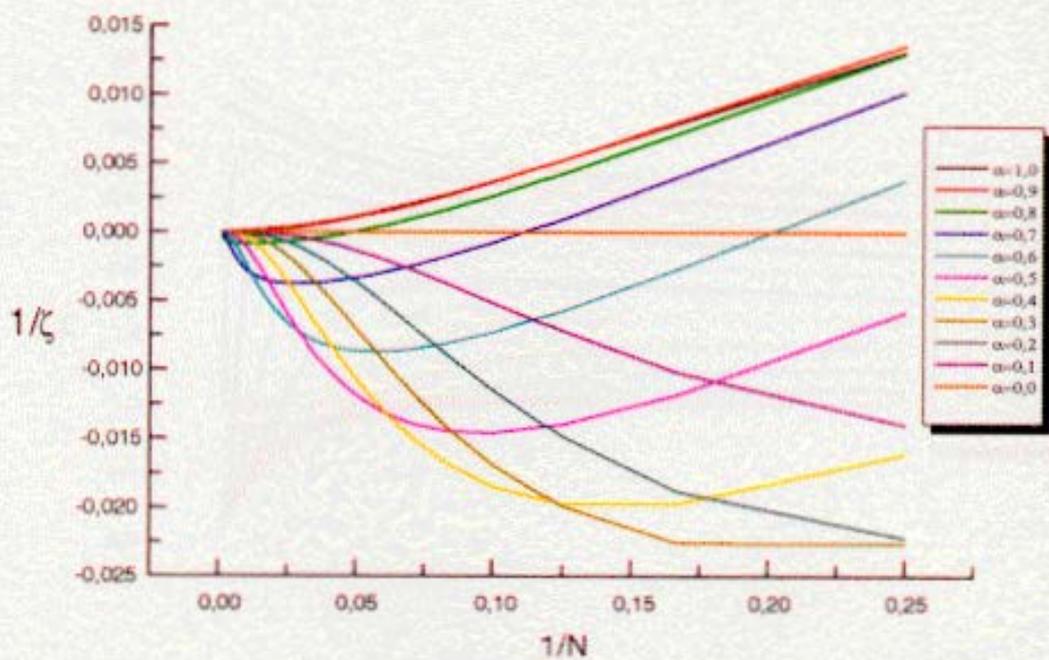


Figura 3-22b: coeficiente da correção exponencial para o estado de onda de spin.

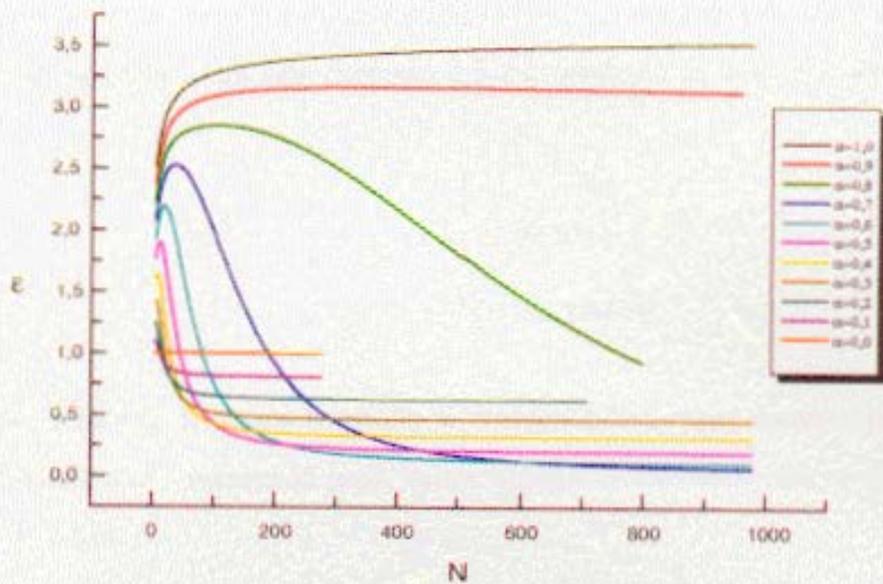


Figura 3-23: termo constante da lei de escala do estado de onda de spin.

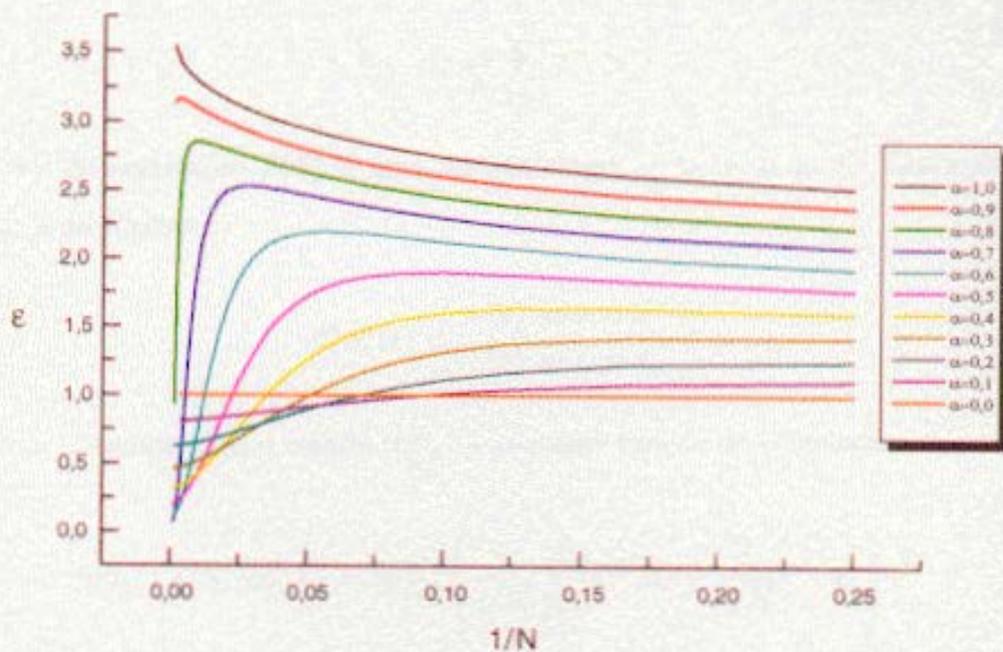


Figura 3-24: termo constante da lei de escala do estado de onda de spin.

### 3.5 Estado da Onda de Spin Ferromagnética

Para esse estado podemos resolver de maneira analítica as equações do *ansatz* de Bethe. Lembrando, as equações para este caso são 2.5 e a condição de *quantização* 2.14.

$$\begin{aligned}\epsilon_f^N &= \frac{1}{4} + \frac{1}{N} (1 - \alpha \cos(k)), \\ k &= 2\pi \frac{I}{N}, \text{ onde } I \text{ é um inteiro.}\end{aligned}$$

Assim dado o inteiro  $I$ , temos o estado  $k$  correspondente que escala com  $\tau = 1$  e  $\xi = +\infty$ . Em particular o estado de mais baixa energia se encontra com  $I = \frac{N}{2} \Rightarrow k = \pi$ , nos levando à energia:

$$\epsilon_{f,k=\pi}^N = \frac{1}{4} - \frac{1}{N} (1 + \alpha).$$

Podemos escrever a função de onda desse estado em função de  $k$ :

$$|\psi_{f,k}^N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^N e^{ikx} |x\rangle.$$

A função de correlação  $S_1^z S_r^z$  é uma matriz diagonal na base de  $S^z$ . Sua ação sobre um ket  $|x\rangle$  é da forma:

$$S_1^z S_r^z |x\rangle = \begin{cases} +|x\rangle & \text{se } r = x \\ -|x\rangle & \text{se } r = x' \end{cases}$$

Com isso obtemos para o estado  $|\psi_{f,k}^N\rangle$  a seguinte função de correlação:

$$\langle \psi_{f,k}^N | (S_1^z S_r^z | \psi_{f,k}^N \rangle) = \langle \psi_{f,k}^N | \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\substack{x=1 \\ x=r}}^N e^{ikx} |x\rangle - \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikr} |x\rangle \right),$$

$$g_{N,r} = \langle \psi_{f,k}^N | S_1^z S_r^z | \psi_{f,k}^N \rangle - \langle \psi_{f,k}^N | S_1^z | \psi_{f,k}^N \rangle \langle \psi_{f,k}^N | S_r^z | \psi_{f,k}^N \rangle = \frac{1}{N} (N-2) - 1 = -\frac{2}{N}.$$

Dessa forma vemos que a função de correlação é uma potência do tamanho. Para calcularmos a ordem de longo alcance, definimos:

$$r = \frac{N}{2} \Rightarrow g_{N,r} = -\frac{1}{r},$$

$$M = \lim_{N \rightarrow \infty} g_{N,r}.$$

Note que isto implica que as correlações vão a zero como uma potência da distância, o que estaria associado a não existência de uma ordem de longo alcance, o que implica, por nossa definição, em um comprimento de correlação infinito. Esse foi exatamente o resultado que inferimos por scaling (definição da função de correlação 1.4).

## 3.6 Gap de Massa

Por definição o gap de massa  $G_1^N$  é,

$$G_1^N = N(\epsilon_1^N - \epsilon_0^N)$$

Nos parágrafos anteriores observamos que  $\epsilon_1^N$  e  $\epsilon_0^N$  obedecem às leis de escala:

$$\begin{aligned} \epsilon_0^N &= \epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_0}{N^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{N}{\zeta}} \text{ (caso anisotrópico) e } \epsilon_0^N = \epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_0}{N^2} \text{ (caso isotrópico)} \\ \epsilon_1^N &= \epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_1}{N^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{N}{\zeta}} \text{ (caso anisotrópico) e } \epsilon_1^N = \epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_1}{N^2} \text{ (caso isotrópico)} \end{aligned}$$

Usando esses resultados, esperamos que o gap de massa se comporte como:

$$\begin{aligned} G_1^N &= (\epsilon_1 - \epsilon_0) \frac{e^{-\frac{N}{\zeta}}}{N^{\frac{1}{2}}} = \epsilon_G \frac{e^{-\frac{N}{\zeta}}}{N^{\frac{1}{2}}}, \text{ para o caso anisotrópico,} \\ G_1^N &= (\epsilon_1 - \epsilon_0) \frac{1}{N} = \epsilon_G \frac{1}{N}, \text{ para o caso isotrópico.} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Na figura 3-25 apresentamos o gap de massa como função de  $N$  e  $\alpha$ . Em 3.26 já podemos observar que o caso isotrópico deve *escalar* com o inverso de  $N$ .

Os resultados das figuras 3-27, 3-29 e 3-30 corroboram de forma aproximada as equações 3.1. Em particular os valores de  $\frac{1}{\zeta}$  apresentados em 3-29 e na tabela 3.6.2 estão em condordância com as predições feitas via *anstaz* de Bethe.

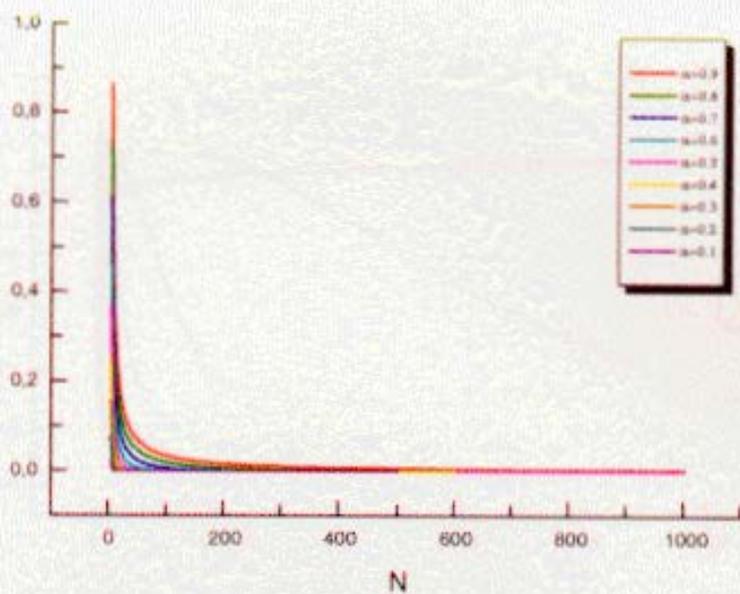


Figura 3-25: gap de massa.

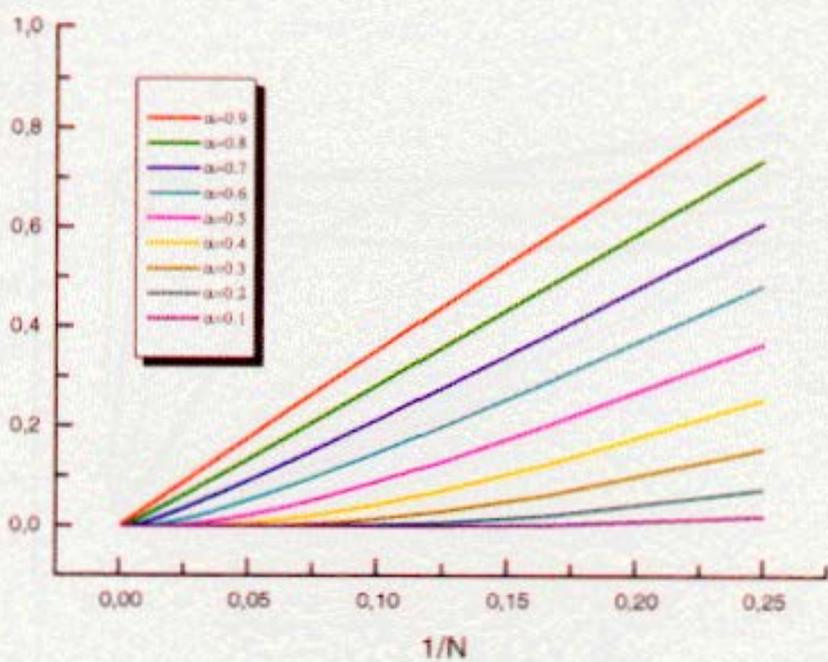


Figura 3-26: gap de massa.

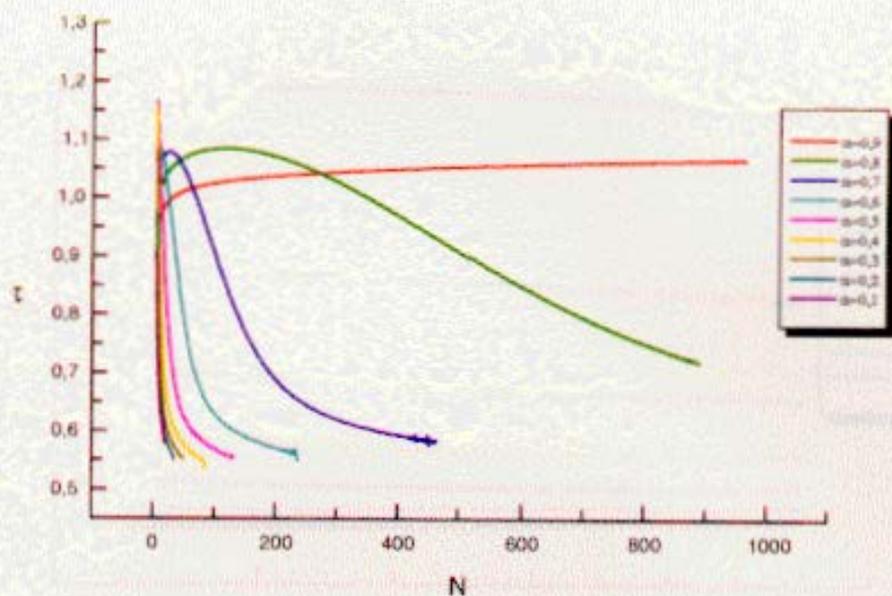


Figura 3-27: coeficiente da correção de potência para o gap de massa.

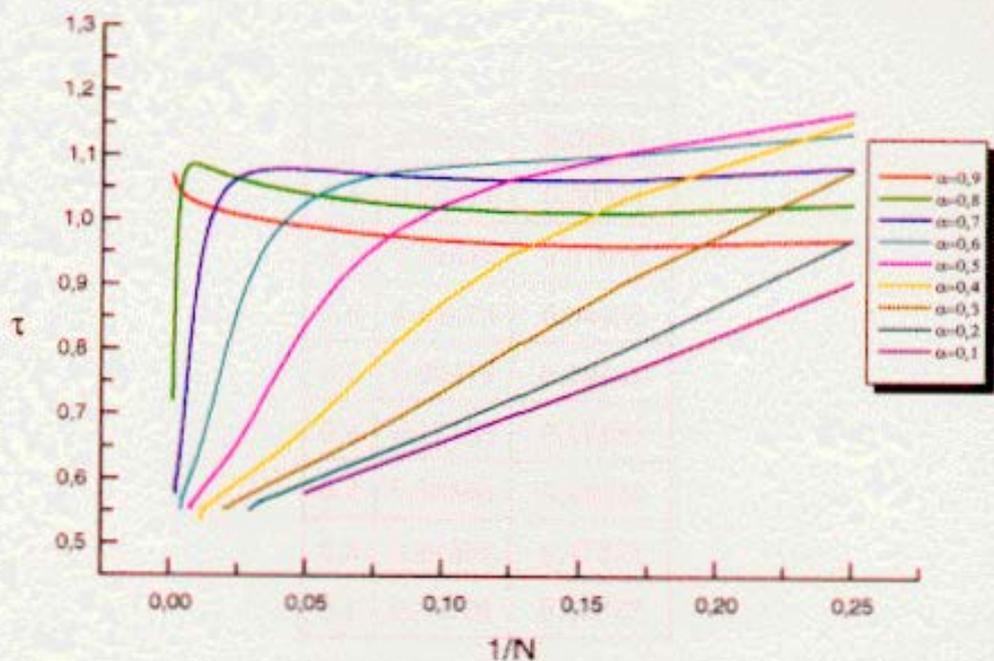


Figura 3-28: coeficiente da correção de potência para o gap de massa.

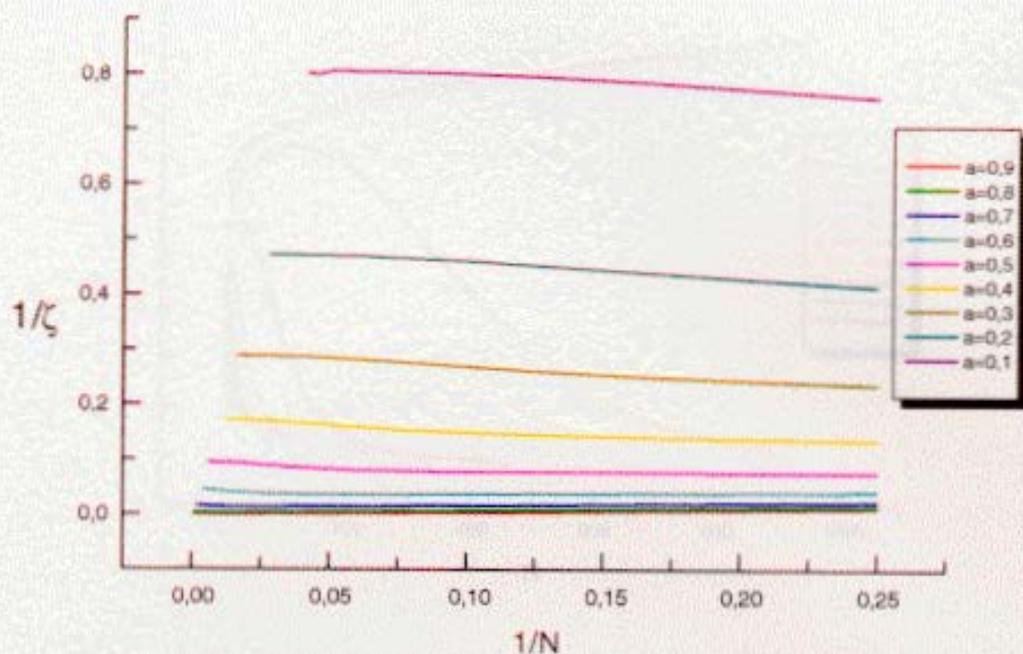


Figura 3-29: coeficiente da correção exponencial para o gap de massa.

$\alpha$	$\frac{1}{\zeta}$	$\frac{1}{\zeta}$ (exato)
0,9	0,00010	0,00010
0,8	0,00311	0,00324
0,7	0,01612	0,01618
0,6	0,04473	0,04480
0,5	0,09419	0,09441
0,4	0,17163	0,17189
0,3	0,28890	0,28928
0,2	0,47251	0,47317
0,1	0,80776	0,80847

Tabela 3.6.2 - Comparação do último valor de  $\frac{1}{\zeta}$  na figura 3-29 e o valor analítico.

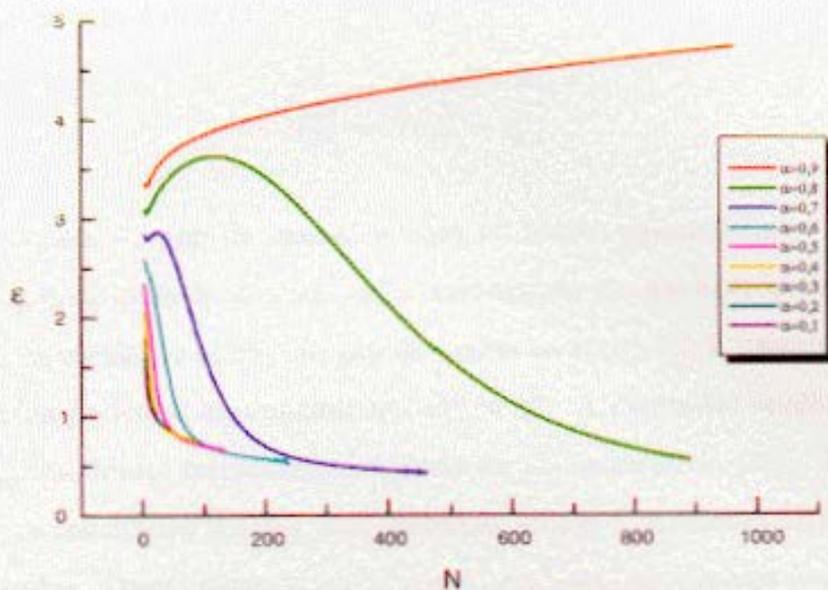


Figura 3-30: termo constante da lei de escala do gap de massa.

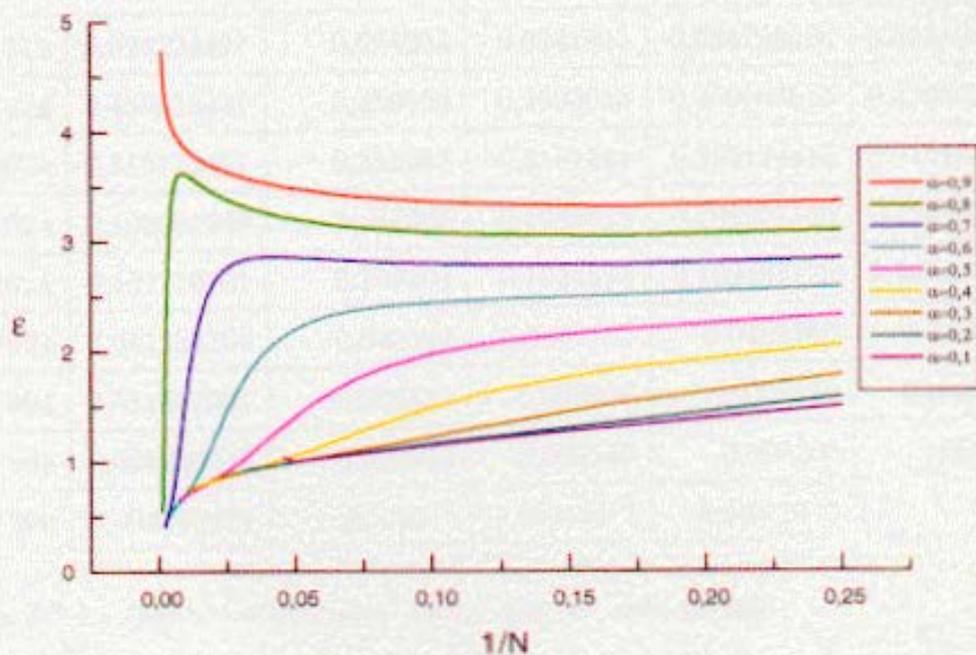


Figura 3-31: termo constante da lei de escala do gap de massa.

### 3.7 Gap da Onda de Spin

O gap da onda de spin é definido como:

$$G_2^N = N(\epsilon_2^N - \epsilon_0^N)$$

De forma oposta ao gap de massa, é nulo no limite termodinâmico para todos os valores de  $\alpha$ , o gap da onda de spin tem valor nulo apenas no caso isotrópico. Para calcular os coeficientes de escala do estado do gap de massa na seção 3.2.4, usamos que  $\epsilon_1^\infty = \epsilon_0^\infty$ . Da mesma forma podemos argumentar que  $\epsilon_2^\infty = \epsilon_0^\infty$ . A expressão analítica para o gap da onda de spin no limite termodinâmico pode ser encontrado em [35]<sup>1</sup>. Na tabela 3.7.1 apresentamos os resultados obtidos para sistemas finitos e os valores extrapolados pelos diferentes métodos. Como podemos ver os resultados estão em perfeita concordância com o resultado analítico.

$\alpha$	N	$G_2^N$	$G_2^\infty$ (Shank)	$G_2^\infty$ (VBS)	$G_2^\infty$ (Taylor)	$G_2^\infty$ (exato)
0,1	290	0,805569922	0,805521	0,8055133	0,805512490	0,805512497
0,2	712	0,624224497	0,624204	0,6241995	0,624199526	0,624199526
0,3	1024	0,459528431	0,459506	0,4595035	0,459503515	0,459503519
0,4	1024	0,315173451	0,315285	0,3151244	0,315124412	0,315124412
0,5	1024	0,195001449	0,194908	0,1949011	0,194901135	0,194901135
0,6	1024	0,102716701	0,102504	0,1024874	0,102487170	0,102487172
0,7	1024	0,041184366	0,040592	0,0404185	0,0405350	0,0405387
0,8	994	0,011687991	0,008822	0,008900	0,008836	0,0088026
0,9	968	0,005460446	0,000974	0,000149	0,000205	0,000303
1,0	990	0,004693474	$7,36 \times 10^{-4}$	$1,30 \times 10^{-6}$	$-5,24 \times 10^{-6}$	0

Tabela 3.7.1 - valores encontrados para o gap da onda de spin.

<sup>1</sup> $G_2^\infty = \alpha \sinh(\gamma) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\cosh(n\gamma)}$

Nos parágrafos anteriores vimos que  $\epsilon_2^N$  e  $\epsilon_0^N$  obedecem as leis de escala:

$$\begin{aligned}\epsilon_0^N &= \epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_0}{N^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{N}{\zeta}} \text{ (caso anisotrópico) e } \epsilon_0^N = \epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_0}{N^2} \text{ (caso isotrópico)} \\ \epsilon_2^N &= \epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_2}{N} \text{ (caso anisotrópico) e } \epsilon_2^N = \epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_2}{N^2} \text{ (caso isotrópico)}\end{aligned}$$

Isto implica que o gap da onda de spin tem a forma:

$$\begin{aligned}G_2^N &= \epsilon_2 - \epsilon_0 \frac{e^{-\frac{N}{\zeta}}}{N^{\frac{1}{2}}}, \text{ para o caso anisotrópico,} \\ G_2^N &= (\epsilon_2 - \epsilon_0) \frac{1}{N}, \text{ para o caso isotrópico.}\end{aligned} \tag{3.2}$$

Assim vemos que  $\epsilon_2$  é o responsável pelo valor não nulo de  $G_2^\infty$  no limite termodinâmico. Esse resultado é apresentado na tabela 3.7.2. Para  $\alpha \leq 0,7$  obtivemos uma boa concordância entre os valores de  $\epsilon_2^N$  e  $G_2^\infty$ . Os casos  $\alpha = 0,8$  e  $0,9$  apresentam a mesma tendência e provavelmente acharão os valores corretos para  $N$  suficientemente grande (veja figura 3-24). A figura 3-32 mostra que, no caso isotrópico, o gap tende a zero com o inverso de  $N$ .

Seguindo o que fizemos nos parágrafos anteriores, estimamos  $\tau$ ,  $\frac{1}{\zeta}$  e  $\epsilon$  usando os valores da tabela 3.7.1. Os resultados são apresentados nas figuras 3-34, 3-36 e 3-38. Podemos ver que o caso isotrópico realmente *escala* com o inverso de  $N$ . Já o caso anisotrópico revelou-se diferente do que esperávamos. Não foi observada nenhuma dependência exponencial e, para  $N$  suficientemente grande,  $\tau$  é igual a 2 (independendo do valor da anisotropia). Será necessário estudarmos termos de ordem superior no estado da onda de spin para explicarmos este comportamento. Contudo, desde já, podemos concluir que a lei de escala, que governa o comportamento de  $\epsilon_2^N$  (figura 3-23 e 3-24), é a responsável por nos impedir de observar o termo exponencial de 3.2.

$\alpha$	N	$\varepsilon_2^N$	$G_2^\infty$
1,0	978	3,5271	0,0000
0,9	958	3,1310	0,0003
0,8	798	0,9330	0,0088
0,7	1020	0,0703	0,0405
0,6	1020	0,1117	0,1025
0,5	1020	0,1989	0,1949
0,4	1020	0,3171	0,3151
0,3	1020	0,4605	0,4595
0,2	708	0,6251	0,6242
0,1	278	0,8074	0,8055
0,0	278	1,0000	1,0000

Tabela 3.7.2 - comparação dos valores obtidos no parágrafo 3.4 e o valor analítico.

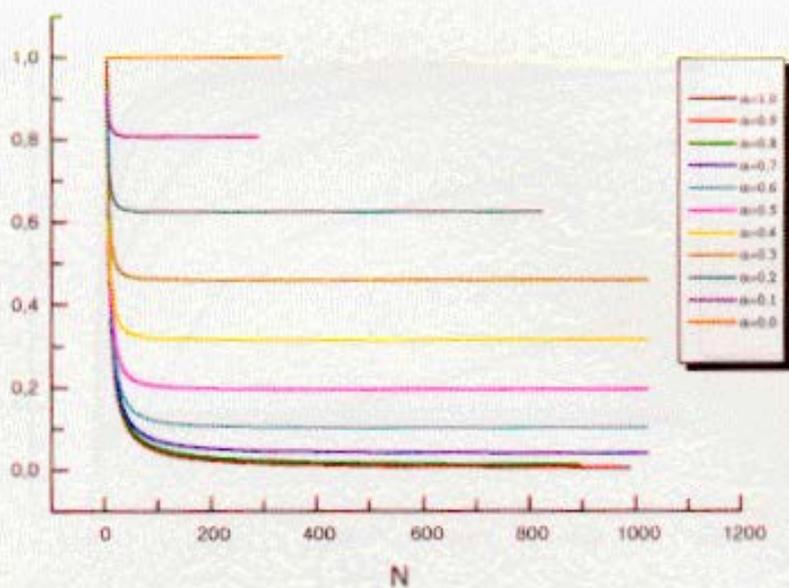


Figura 3-31: gap da onda de spin antiferromagnética.

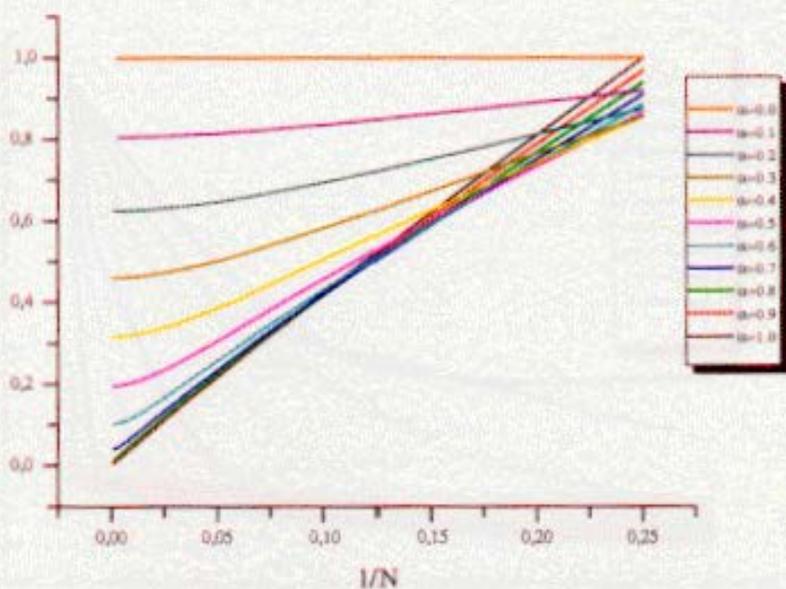


Figura 3-32: gap da onda de spin antiferromagnética.

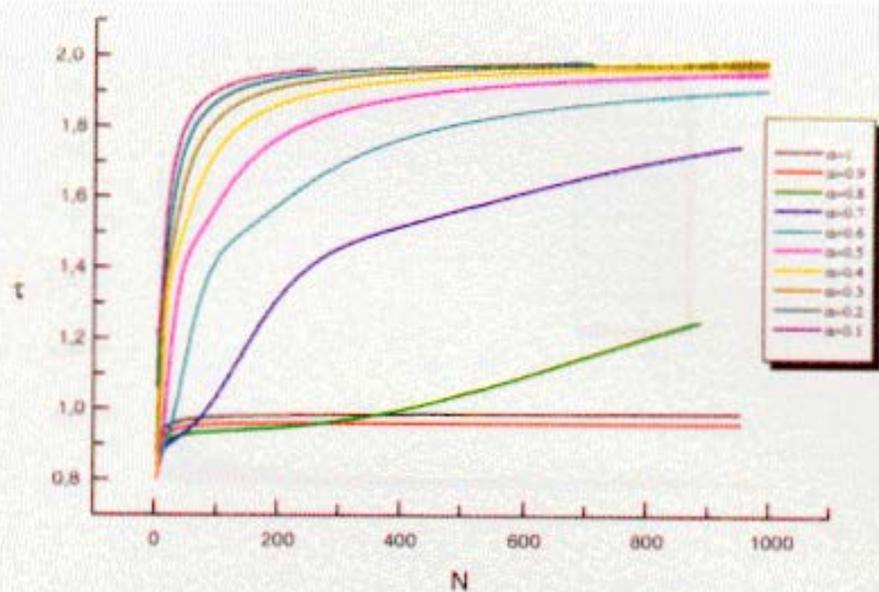


Figura 3-33: coeficiente da correção de potência para o SWG.

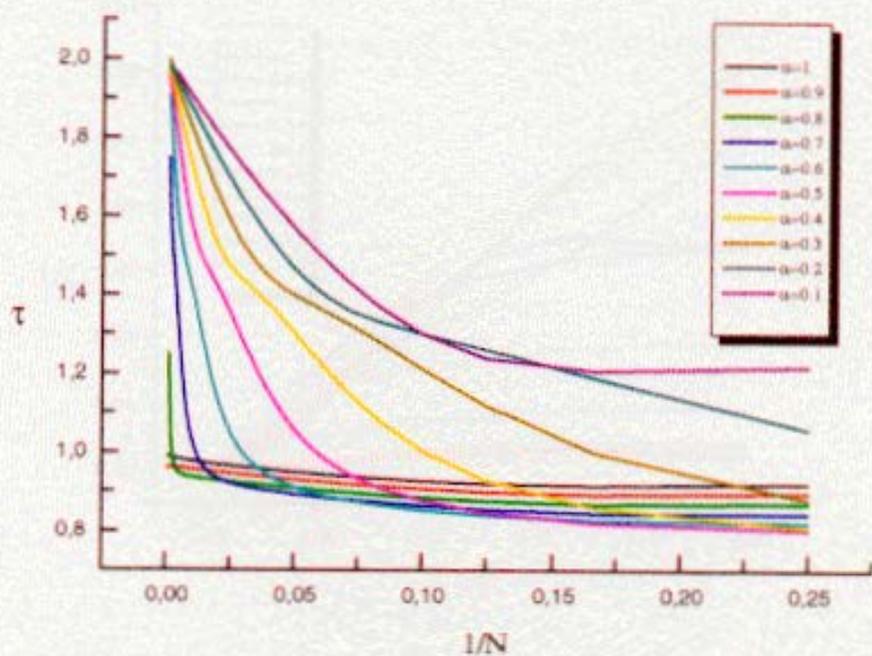


Figura 3-34: coeficiente da correção de potência para o SWG.

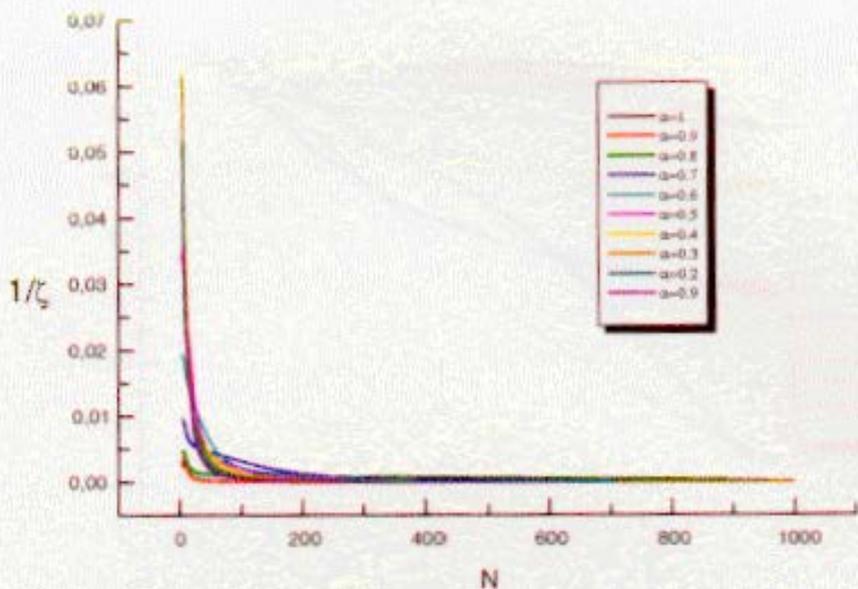


Figura 3-35: coeficiente da correção exponencial para o SWG.

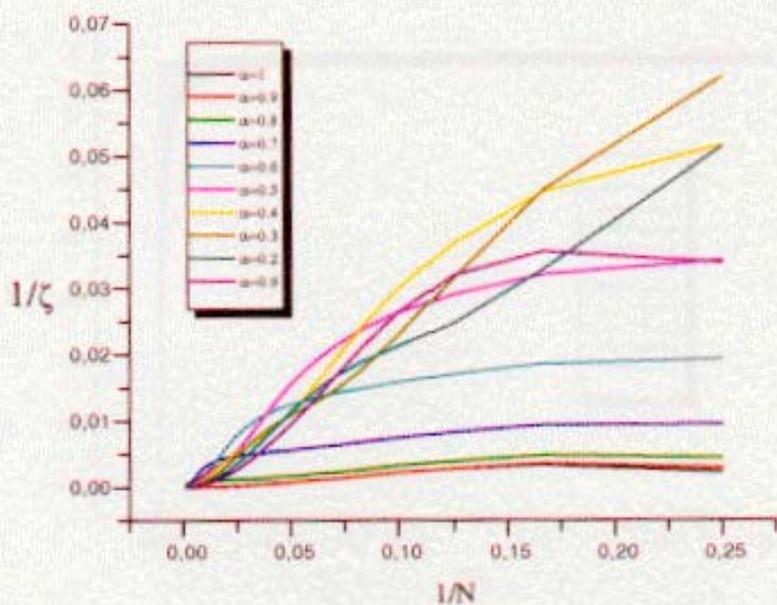


Figura 3-36: coeficiente da correção exponencial para o SWG.

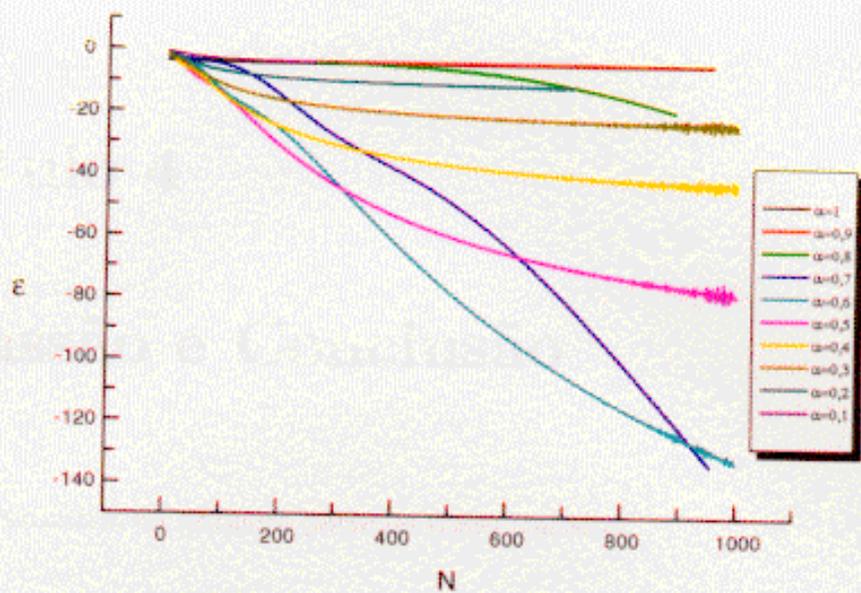


Figura 3-37: termo constante da lei de escala do SWG.

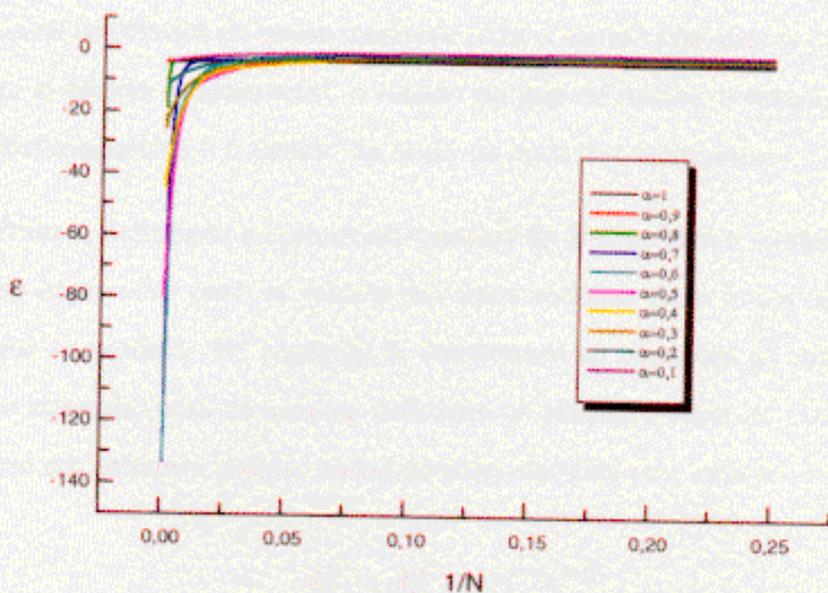


Figura 3-38: termo constante da lei de escala do SWG.

# Capítulo 4

## Discussão e Conclusão

De maneira sintética, na primeira parte de nosso trabalho:

- definimos o modelo XXZ,
- colocamos de forma qualitativa e quantitativa o que seriam os efeitos de tamanho, introduzindo conceitos importantes como o comprimento de correlação.
- definimos os estados de nosso interesse para o estudo dos efeitos de tamanho. Esses foram: o estado fundamental, o estado do gap de massa, o estado da onda de spin antiferromagnética e o estado da onda de spin ferromagnética.

No capítulo 2, definimos e aplicamos o *ansatz* de Bethe para o modelo XXZ. Com ele, encontramos expressões para os valores das auto-energias para todos os auto-estados da hamiltoniana do modelo. No capítulo 3, resolvemos as equações do *ansatz* e estudamos os efeitos de tamanho para os estados definidos no primeiro capítulo. Usamos para isso o *ansatz* de que em primeira ordem, todas as auto-energias tem uma lei de escala da forma:

$$A_0^N = A_0^\infty + \varepsilon N^{-\tau} e^{-\frac{N}{\xi}}$$

O comportamento desses estados em função de  $\frac{1}{N}$  é mostrado para diversos valores da anisotropia nas figuras 4-1, 4-2, 4-3 e 4-4. Como vimos anteriormente, o limite ter-

modinâmico é atingido mais rapidamente nos casos de alta anisotropia ( $\alpha \ll 1$ ).

Apesar de não ter sido calculado o estado do gap de massa do caso isotrópico, podemos extrapolar do comportamento da figura 4-2 que ele coincide com o estado da onda de spin antiferromagnética para todos os valores de  $N$ . Essa conclusão está de acordo com a solução para pequenas cadeias feitas por Orbach em [27] e os trabalhos analíticos de Yang-Yang. Por isso, no caso isotrópico, todas as afirmações feitas para o estado da onda de spin antiferromagnética, também valem para o estado do gap de massa.

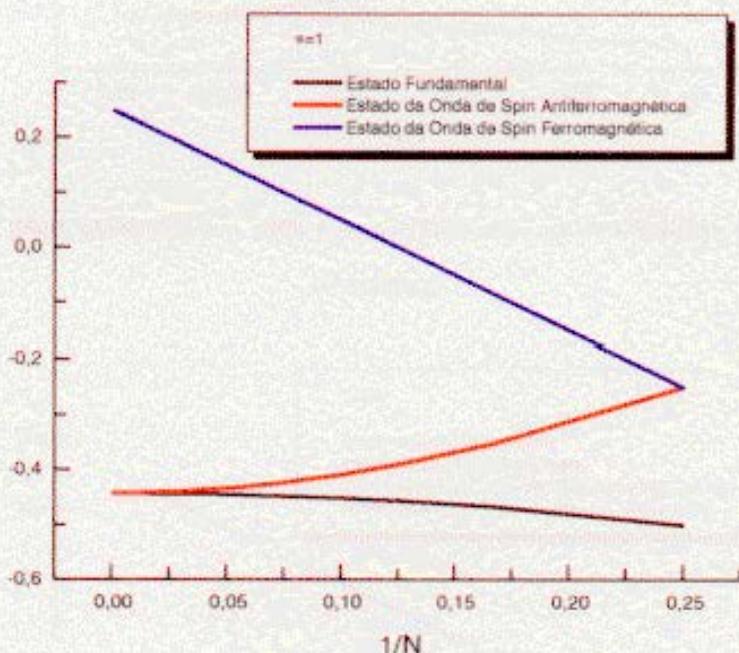


Figura 4-1: caso isotrópico.

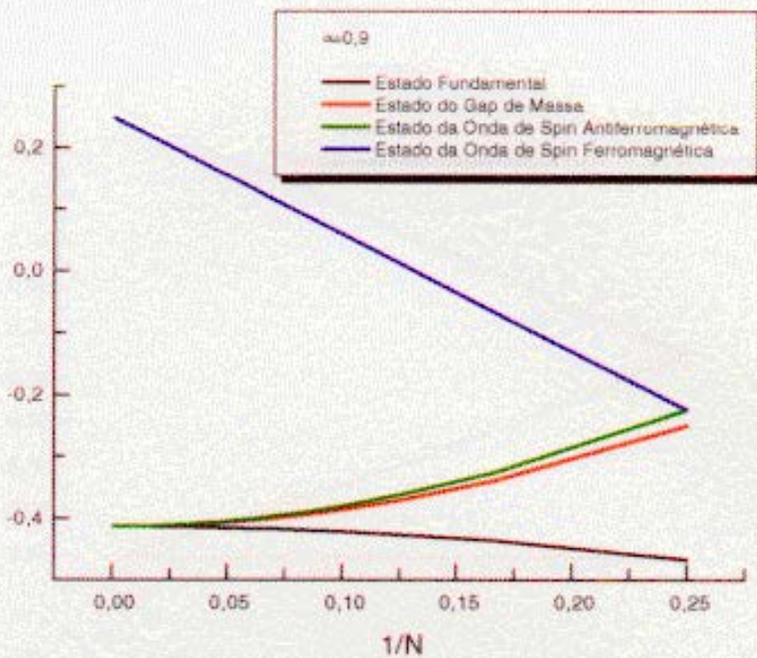


Figura 4-2: caso anisotrópico com comportamento muito similar ao do sistema isotrópico.

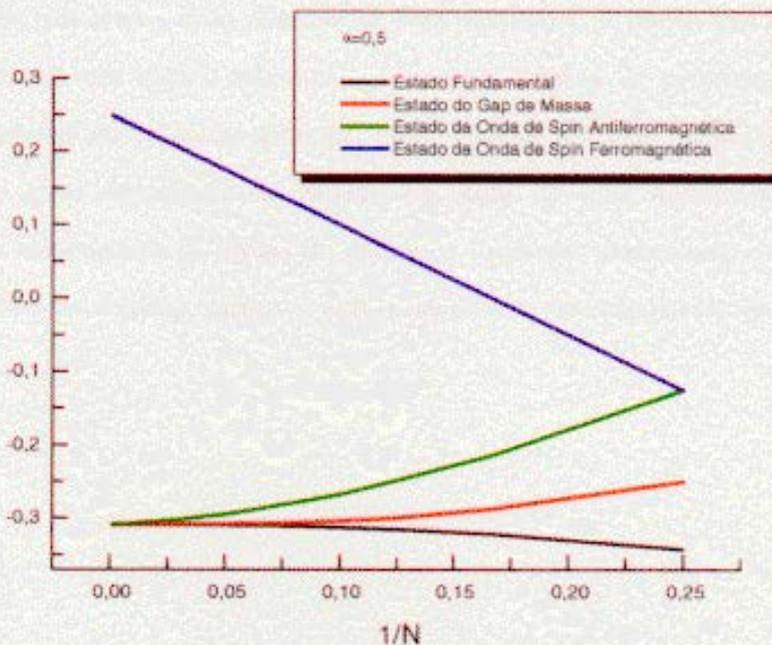


Figura 4-3: valor intermediário da anisotropia (entre o caso isotrópico e o caso de Ising).

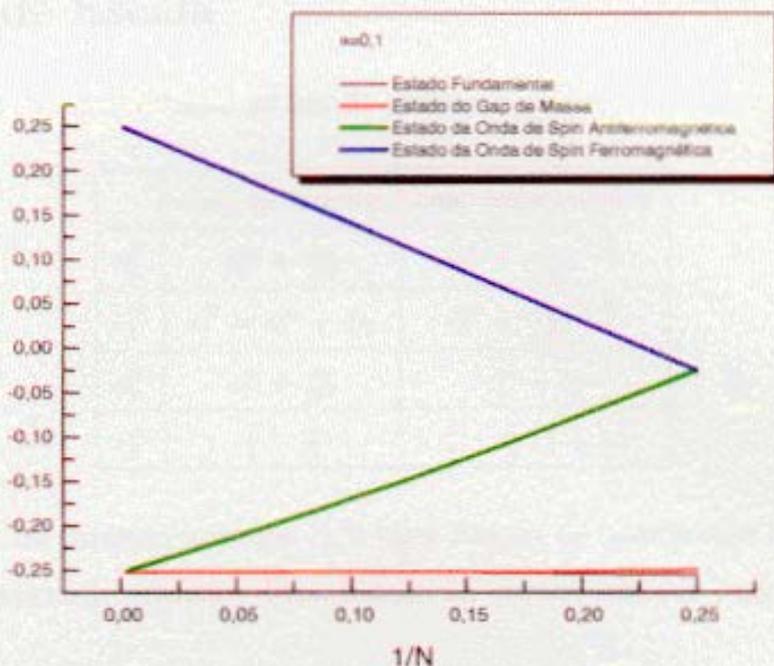


Figura 4-4: caso altamente anisotrópico, com comportamento muito próximo do caso de Ising.

Nosso trabalho nos leva a duas discussões bem distintas. É óbvio que as leis de escala, por si só, constituem um tópico relevante. Isto será o tema do próximo parágrafo: um resumo das expressões do capítulo anterior, com especial atenção para o ponto isotrópico e uma discussão mais detalhada do estado da onda de spin antiferromagnética. No último parágrafo retornamos às idéias do primeiro capítulo, discutindo como podemos, a partir de resultados de *scaling*, inferir o comprimento de correlação de sistemas no limite termodinâmico.

## 4.1 Leis de Escala

Em primeira ordem, encontramos as leis de escala:

	caso isotrópico	caso anisotrópico
$\epsilon_0^N$	$\epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_0}{N^2}$	$\epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_0}{N^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{N}{\zeta}}$
$\epsilon_1^N$	$\epsilon_1^N = \epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_1}{N^2}$	$\epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_1}{N^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{N}{\zeta}}$
$\epsilon_2^N$	$\epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_2}{N^2}$	$\epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_2}{N}$
$\epsilon_f^N$	$\frac{1}{4} - \frac{2}{N}$	$\frac{1}{4} - \frac{1}{N}(1 + \alpha)$

Como vimos no capítulo anterior,  $\frac{1}{\zeta}$  é uma função da anisotropia  $\alpha$  (mostrada na figura 3-7). A expressão analítica dessa função foi encontrada por Vega e Woynarovich em [31]:

$$\frac{1}{\zeta} = -\ln \left[ 2e^{-\frac{\gamma}{2}} \prod_{n=0}^{\infty} \left( \frac{1 + e^{-2\gamma(2n+2)}}{1 + e^{-2\gamma(2n+1)}} \right)^2 \right], \text{ com } \gamma = \arccos h \left( \frac{1}{\alpha} \right).$$

Pode ser observado nas tabelas 3.2.2, 3.3.2 e 3.6.2 que nossos resultados numéricos confirmam esta previsão analítica para o estado fundamental e para o gap de massa.

Também está de acordo com o trabalho de Vega e Woynarovich, para a região anisotrópica, a correção de potência com valor  $\frac{3}{2}$ . Nossos resultados mostram que, para a região de alta anisotropia, os termos constantes  $\epsilon_0$  e  $\epsilon_1$  tem o mesmo limite (veja tabela 4.2.1), o que está de acordo como as equações 1.8 e 1.9. O ponto interessante é que esse limite é alcançado de forma muito diferente pelos dois estados (como pode ser visto na figura 4-5). Isto não é óbvio nas expressões analíticas 1.8 e 1.9, que a princípio sugerem que os estados *escalam* da mesma forma. Sem dúvida, essa é uma assinatura dos efeitos de tamanho. Isto significa que mesmo obtendo bom resultados para os termos  $\frac{1}{\zeta}$  e  $\tau$ , continuamos longe do regime de validade das expressões 1.8 e 1.9. Os resultados finitos continuam sentindo o ponto isotrópico, que não apresenta essa simetria (veja as expressões 1.10 e 1.11).

$\alpha$	N	$\varepsilon_0^N$	$\varepsilon_1^N$
0,9	968	-0,82518	4,04358
0,8	948	-0,76514	0,95884
0,7	476	-0,14867	0,22242
0,6	230	-0,1297	0,27614
0,5	124	-0,25251	0,33175
0,4	82	-0,34898	0,37419
0,3	54	-0,4043	0,43795
0,2	34	-0,45009	0,45607
0,1	20	-0,50193	0,4976

Tabela 4.2.1 - comparação o termo constante do estado do estado fundamental e o estado do gap de massa.

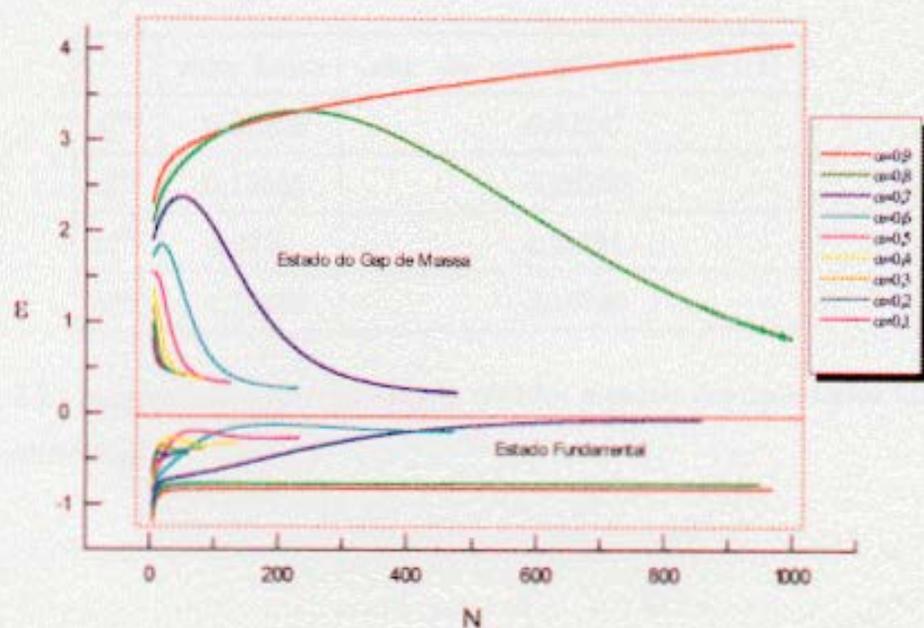


Figura 4-5: comparação entre  $\varepsilon_0$  e  $\varepsilon_1$ .

Como pode ser observado nas figuras 3-6 e 3-22, o caso isotrópico apresenta um comportamento de potência para todos os estados. Isso confirma, em primeira ordem, as expressões 1.10 e 1.11 de Woynarovich e Eckle. Com base nelas, fizemos nossos cálculos propondo as seguintes leis de escala:

$$\epsilon_0^N = \epsilon_0^\infty + \frac{a_0}{N^2} + \frac{b_0}{N^2 (\ln N)^3},$$

$$\epsilon_1^N = \epsilon_2^N = \epsilon_0^\infty + \frac{a_1}{N^2} + \frac{b_1}{N^2 \ln N}.$$

Na tabela 4.2.2 e nas figuras 4-6, 4-7, 4-8, 4-9 e 4-10, apresentamos os resultados obtidos. Os termos de correção logaritmica  $b_0$  e  $b_1$  se encontram ainda muito longe dos valores previstos em 1.10 e 1.11, porém apresentam uma clara tendência na direção desses valores. Os termos de primeira ordem,  $a_0$  e  $a_1$ , estão em concordância com os valores previstos, se mostrando melhores que os resultados obtidos anteriormente ( $\epsilon_0^{968} = -0,82518$  e  $\epsilon_1^{968} = 3,52708$ ).

	valor finito	valor das expressões 1.10 e 1.11
$a_0^{980}$	-0,82253	-0,82247
$b_0^{980}$	-0,13555	-0,28235
$a_1^{980}$	4,0722	4,11234
$b_1^{980}$	-1,71478	-2,46740

Tabela 4.2.2 - comparação entre os valores obtidos a partir dos resultados finitos e as expressões assintóticas.

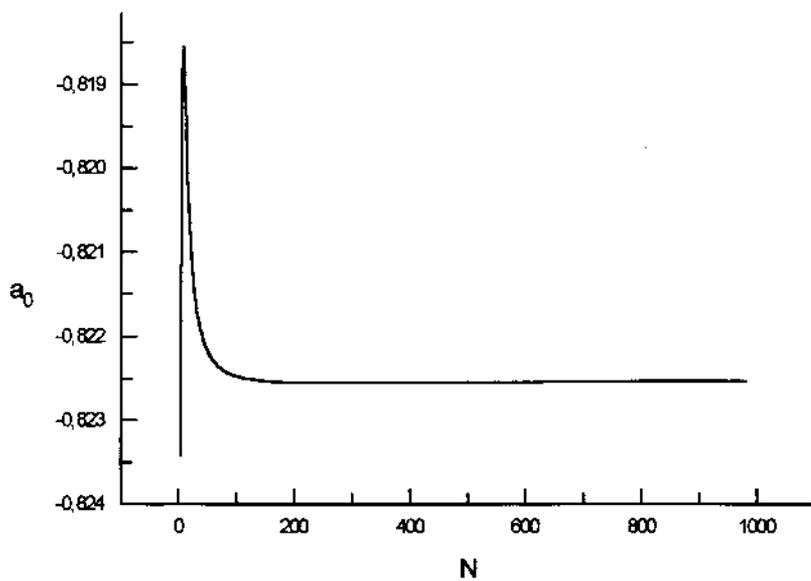


Figura 4-6: correção de primeira ordem para o estado fundamental no caso isotrópico.

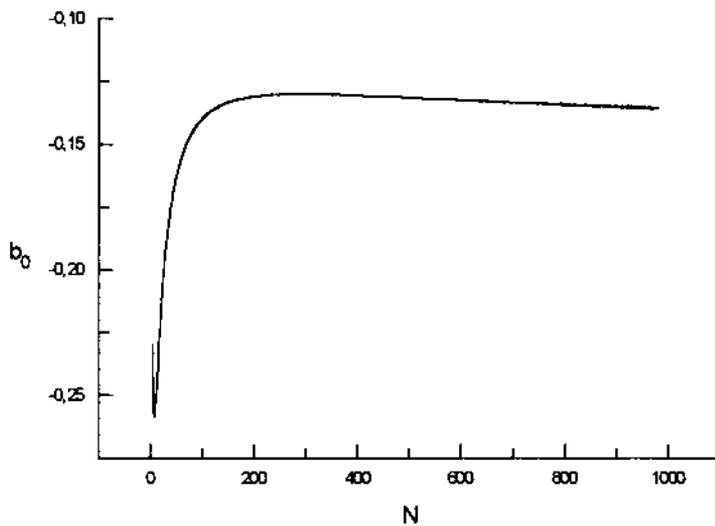


Figura 4-7: primeira correção logarítmica para o estado fundamental no caso isotrópico.

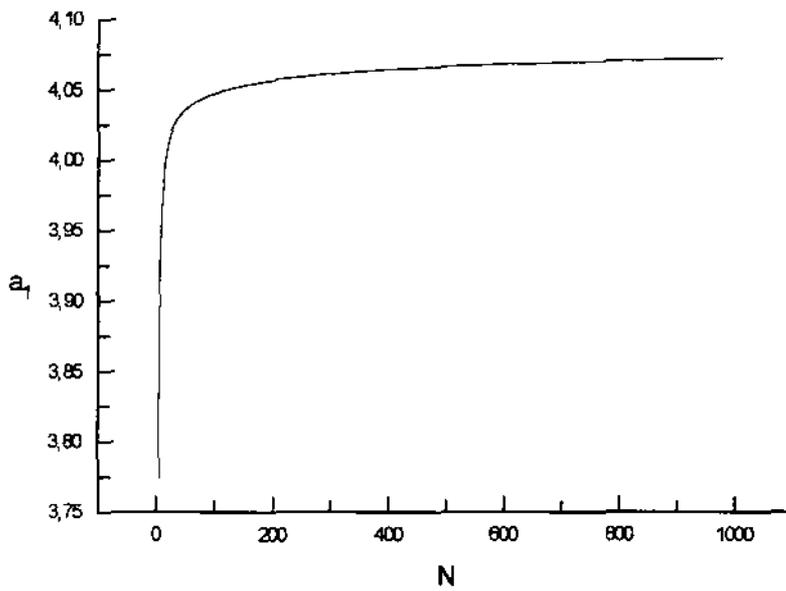


Figura 4-8: correção de primeira ordem para o estado do gap de massa no caso isotrópico.

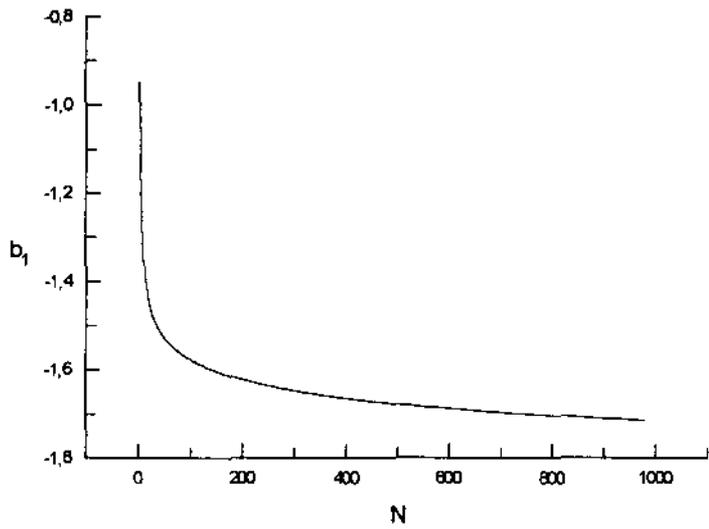


Figura 4-9: primeira correção logarítmica para o estado do gap de massa no caso isotrópico.

O estado da onda de spin antiferromagnética não apresentou dependência exponencial em toda a região não crítica. A figura 3-22 mostra que  $\frac{1}{\zeta}$  não assume um valor significativo (mesmo para cadeias pequenas). Se isso for verdade, uma lei de escala puramente de potências teria uma convergência mais rápida (apresentando resultados melhores). Propomos dessa forma a expressão:

$$\epsilon_2^N = \epsilon_0^\infty + \frac{a}{N} + \frac{b}{N^2} + \frac{c}{N^3}.$$

Através dessa lei esperamos obter informações sobre os termos de correção de ordem superior. Além disso poderemos observar a mudança de comportamento (cross-over) de  $\frac{1}{N^2}$  para  $\frac{1}{N}$  ao sairmos do caso isotrópico. Tomando três valores consecutivos de  $\epsilon_2^N$ , obtemos  $a^N$ ,  $b^N$  e  $c^N$  resolvendo o sistema linear. Nas figuras 4-10 à 4-15 apresentamos os resultados encontrados.

$\alpha$	N	$a^N$	$G_2^N$	$G_2^\infty$
1,0	978	$1,39 \times 10^{-5}$	0,0047506	0
0,9	958	0,0002842	0,0055136	0,0003029
0,85	1718	0,0020443	-	0,0020408
0,8	798	0,0082174	0,0122351	0,0088027
0,7	998	0,0404595	0,0412163	0,0405387
0,6	998	0,1024763	0,1027285	0,1024872
0,5	998	0,1948988	0,1950067	0,1949011
0,4	998	0,3151236	0,3151760	0,3151244
0,3	998	0,4595034	0,4595298	0,4595035
0,2	708	0,6241993	0,6242248	0,6241995
0,1	278	0,8055114	0,8055749	0,8055125

Tabela 4.2.3 - comparação entre o valor do gap da onda de spin e o primeiro termo de correção para o estado da onda de spin.

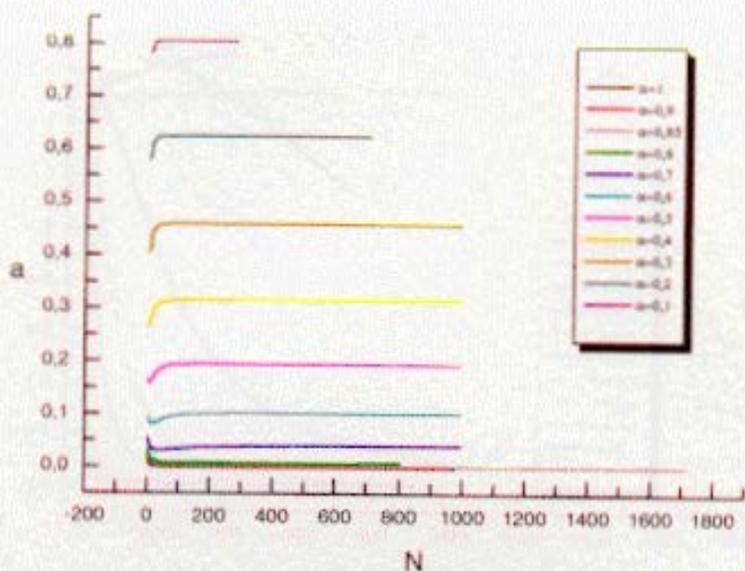


Figura 4-10: termo de correção de primeira ordem para o estado da onda de spin.

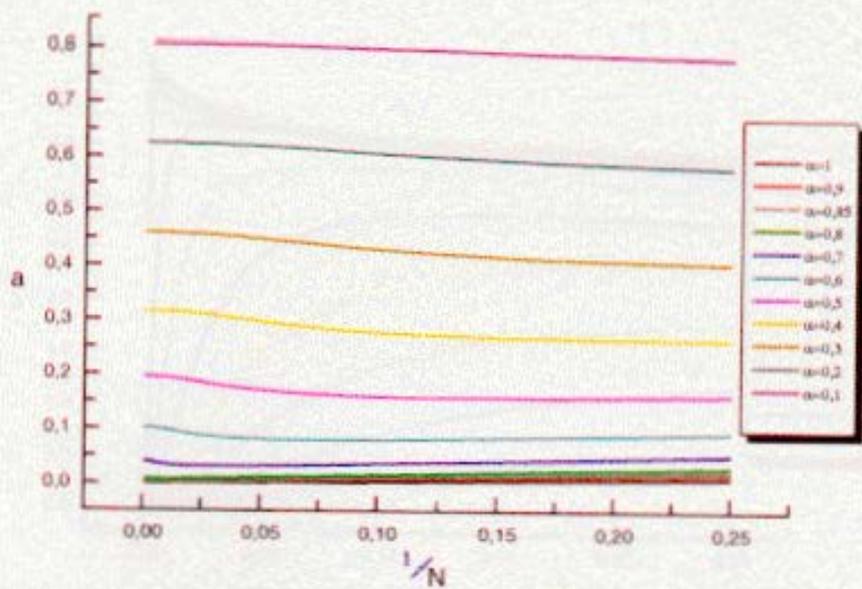


Figura 4-11: termo de correção de primeira ordem para o estado da onda de spin.

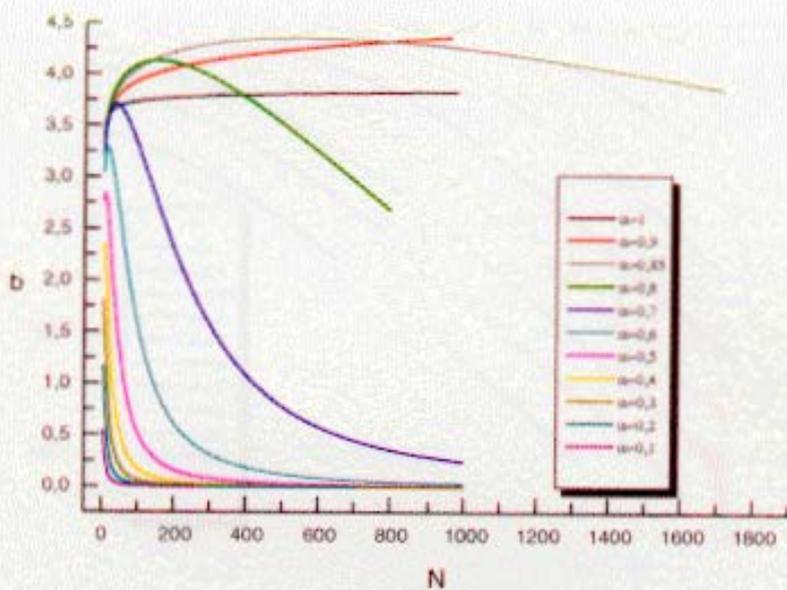


Figura 4-12: termo de correção de segunda ordem para o estado da onda de spin.

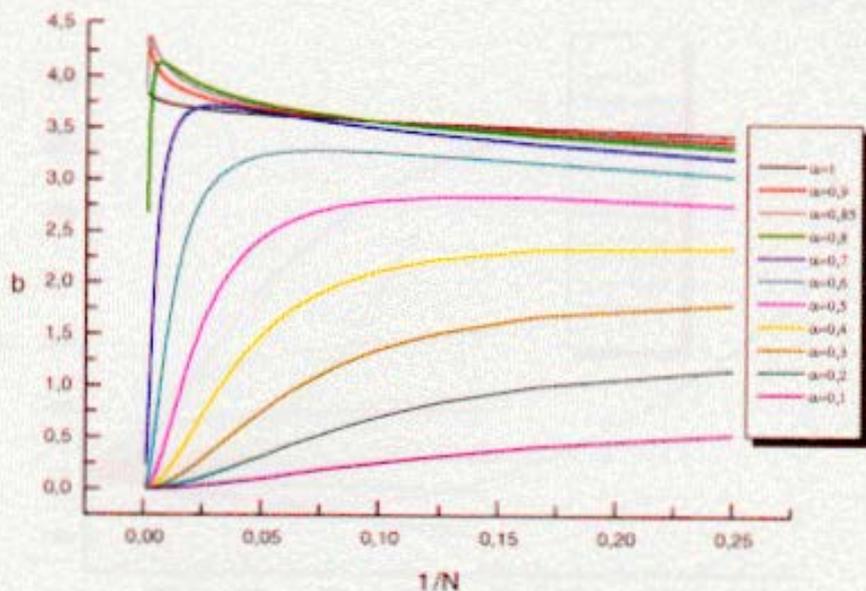


Figura 4-13: termo de correção de segunda ordem para o estado da onda de spin.

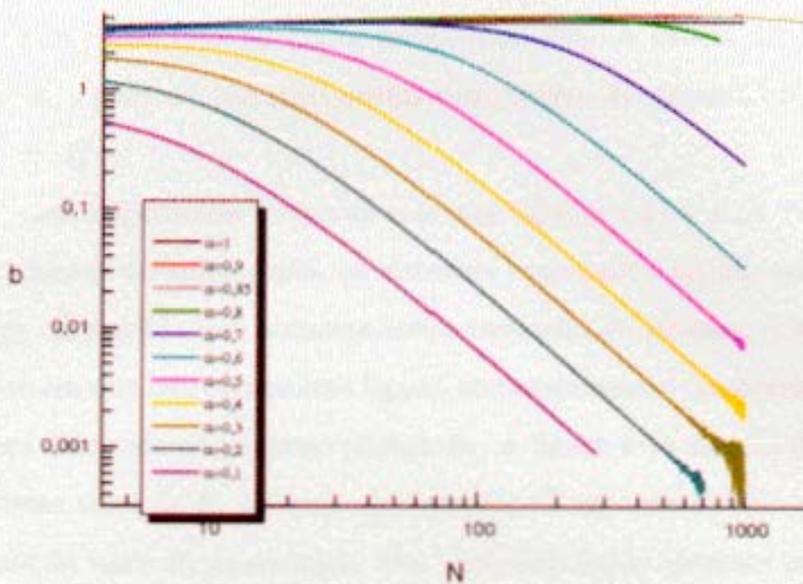


Figura 4-14: termo de correção de segunda ordem para o estado da onda de spin em escala logarítmica.

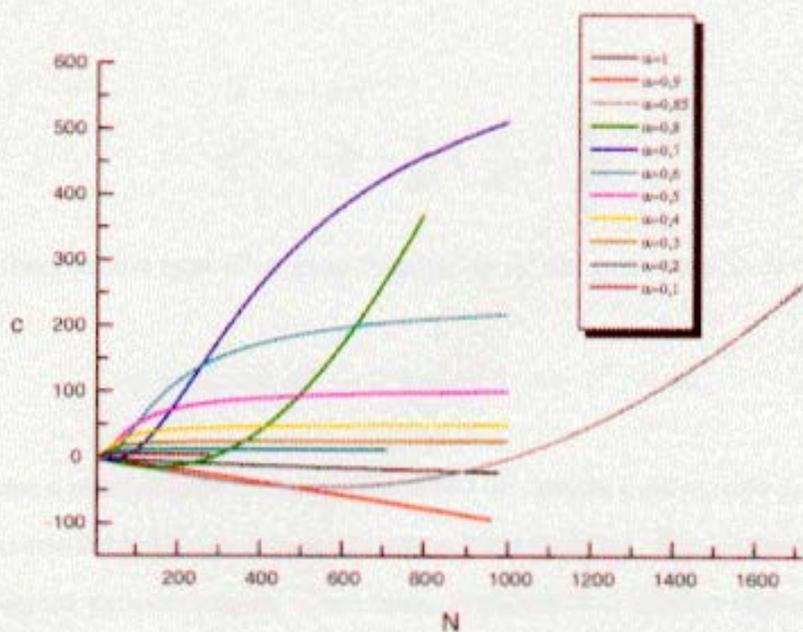


Figura 4-15: termo de correção de terceira ordem para o estado da onda de spin.

As figuras 4-10 e 4-11 apresentam uma convergência extremamente rápida para o termo  $a$ . É importante notar que, como esperávamos, o termo  $a$  é o responsável pelo valor do gap da onda de spin no limite termodinâmico. A tabela 4.2.3 mostra que os valores encontrados para  $a^N$  são pelo menos uma ordem de grandeza mais próximos do valor de  $G_2^\infty$  que  $G_2^N$ .

Outro resultado importante é o *cross-over* nas figuras 4-12 e 4-13. De maneira clara para todos os valores de anisotropia, os sistemas começam com um termo de correção não nulo em  $\frac{1}{N^2}$ . À medida que aumentamos o tamanho do sistema, o valor de  $b^N$  vai a zero. O instante em que isto ocorre está ligado ao comprimento de correlação do sistema, assunto que será discutido no próximo paragrafo. A figura 4-14 mostra de maneira clara que, a partir desse valor de  $N$ , o termo de correção  $b^N$  vai a zero como uma potência de  $N$ , independente do valor da anisotropia. Por regressão linear obtemos que este expoente seria da ordem de 2. Isto implica que, a partir desse ponto, temos uma correção efetiva da ordem de  $\frac{1}{N^4}$  para todos os sistemas finitos, passando a dominar o termo de terceira ordem,  $c$ :

$$b \sim \delta N^{-2},$$

$$\epsilon_2^N = \epsilon_0^\infty + \frac{a}{N} + \frac{c}{N^3} + \frac{\delta}{N^4}.$$

Em 4-15, observamos que  $c^N$  é uma função de  $\alpha$ , tal que quando  $N \rightarrow \infty$ :

$$\alpha \rightarrow 0 \implies c^N \rightarrow 0 \text{ e } \alpha \rightarrow 1 \implies c^N \rightarrow \infty.$$

Note que esse é exatamente o comportamento da função  $\zeta$  de  $\alpha$ . Isto nos levou a pensar se não haveria uma correspondência entre essas duas funções. Em primeira ordem, propomos que elas sejam proporcionais. Com isso, graficamos o último termo das sequências  $c^N(\alpha)$  e a função  $\zeta(\alpha)$  nas figuras 4-16 e 4-17, usando a constante de proporcionalidade  $\kappa = 0,1223$ . A tabela 4.2.4 apresenta os valores numéricos correspondentes.

$\alpha$	N	$c^N$	$\kappa c^N$	$\zeta$	$\frac{1}{\kappa c^N}$	$\frac{1}{\zeta}$
0,7	998	511	62,50	62,50	0,0160	0,0160
0,6	998	218	26,66	22,32	0,0448	0,0375
0,5	998	100	12,23	10,59	0,0944	0,0818
0,4	998	50	6,12	5,82	0,1719	0,1635
0,3	998	25	3,06	3,46	0,2893	0,3270
0,2	708	12	1,47	2,11	0,4732	0,6813
0,1	278	5	0,61	1,24	0,8085	1,6352

Tabela 4.2.4 - comparação entre as funções  $\zeta(\alpha)$  e  $c(\alpha, N)$ .

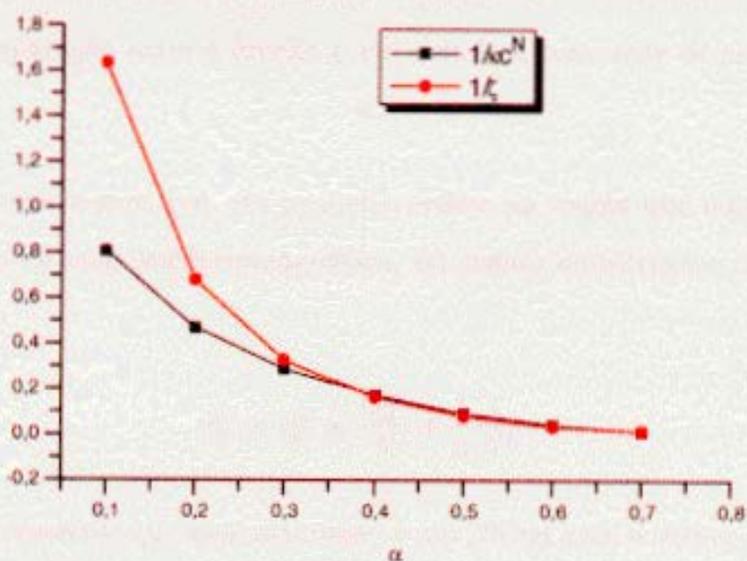


Figura 4-16: comparação entre a função  $\zeta$  e  $c$  usando a constante de proporcionalidade

$\kappa$ .

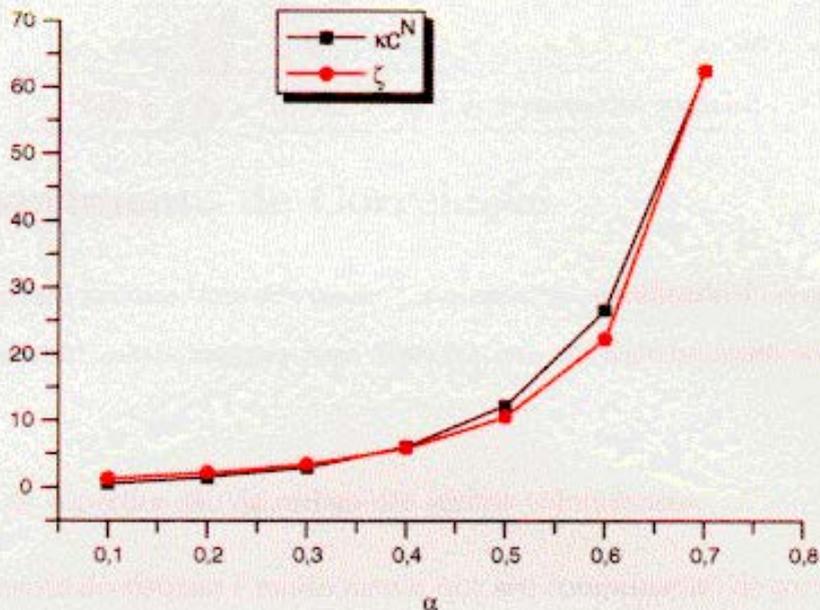


Figura 4-17: comparação entre a função  $\zeta$  e  $c$  usando a constante de proporcionalidade  $\kappa$ .

A figura 4-17 nos sugere que, em primeira ordem na região que estamos estudando, o estado da onda de spin antiferromagnética, na região anisotrópica, obedece à lei de escala:

$$\epsilon_2^N = \epsilon_0^\infty + \frac{G_2^\infty}{N} + \frac{1}{\kappa} \frac{\zeta}{N^3}.$$

É importante ressaltar que esta expressão é um *fitting* para o termo em  $N^{-3}$  (o único deste trabalho).

Para finalizar, usando os resultados desenvolvidos no capítulo 3 e neste parágrafo, o gap de massa e o gap da onda de spin obedecem às leis de escala:

	caso anisotrópico	caso isotrópico
$G_1^N$	$(\varepsilon_1 - \varepsilon_0) \frac{e^{-\frac{\zeta}{N^2}}}{N^2}$	$(a_1^\infty - a_0^\infty) \frac{1}{N} + \text{correções logarítmicas}$
$G_2^N$	$G_2^\infty + \frac{1}{\kappa} \frac{\zeta}{N^2}$	$(a_1^\infty - a_0^\infty) \frac{1}{N} + \text{correções logarítmicas}$

## 4.2 Comprimento de Correlação

No primeiro capítulo fizemos uma discussão qualitativa do significado do comprimento de correlação. Definimos quatro regimes bem distintos que um sistema passa ao ser *escalado*.

Recapitulando:

- os efeitos de superfície são da ordem dos efeitos volumétricos.
- o comprimento do sistema é muito menor que seu comprimento de correlação; neste caso podemos considerar o comprimento de correlação como infinito.
- o comprimento do sistema é da ordem de seu comprimento de correlação.
- o comprimento do sistema é maior que seu comprimento de correlação, ele terá seu comportamento convergindo rapidamente para o limite termodinâmico.

Aplicando essa idéia ao modelo XXZ, um sistema anisotrópico suficientemente pequeno terá um comportamento similar ao do caso isotrópico (com comprimento de correlação infinito). Isto pode ser observado ao longo de todo o nosso trabalho. Por exemplo: na figura 3-4 os casos  $\alpha = 0,9$  e  $0,8$  têm inicialmente o mesmo comportamento que  $\alpha = 1$  (tendendo ao valor 2). Em um determinado instante, a curva de  $\alpha = 0,8$  se separa das curvas de  $\alpha = 1$  e  $0,9$ , procurando o valor  $\frac{3}{2}$ . Como havíamos dito no capítulo 3, esperamos que (para  $N$  suficientemente grande)  $\alpha = 0,9$  tenha o mesmo o comportamento que quando  $\alpha = 0,8$ . Este fenômeno também pode ser observado nos gráficos 3-9, 3-13, 3-17, 3-21 e 3-24. Contudo, a melhor caracterização do *cross-over* entre as leis de escala se encontra nos gráficos 4-12, 4-13 e 4-14. Note que inicialmente para todos os valores

Na figura 4-18 ampliamos a figura 3-3 emarcamos os pontos com 1, 2,5 e 5% de desvio do valor do caso isotrópico.

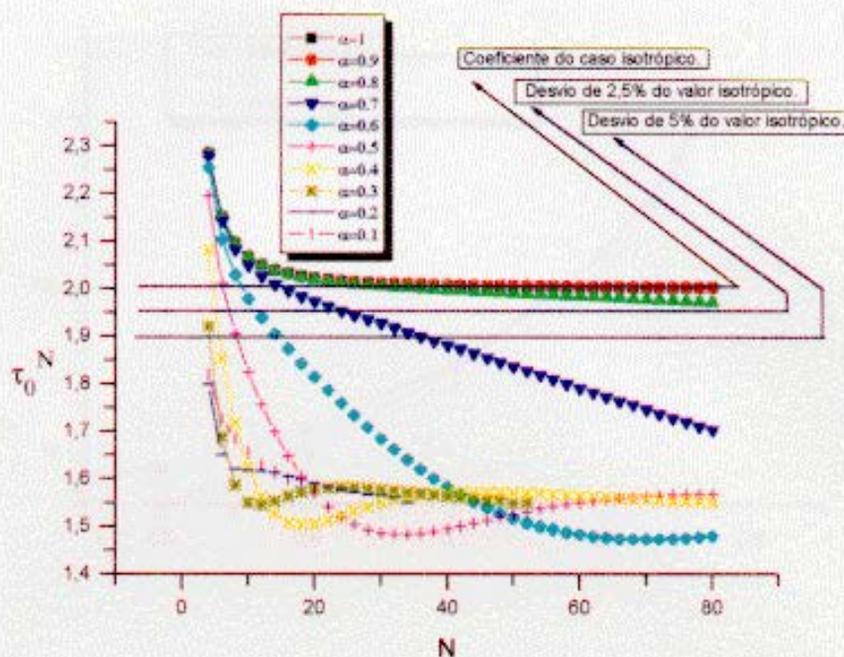


Figura 4-18: ampliação da figura 3-3.

Em 4-13 o caso isotrópico é nitidamente uma função crescente, e por isso, a posição dos máximos das curvas  $b(N, \alpha = 1)$  também corresponderiam a uma estimativa para do comprimento de correlação. Esses valores estão listados na tabela 4.3.1 e juntamente com os desvios de  $\tau_0^N$  constituem uma estimativa para o comprimento de correlação. Fisicamente eles correspondem ao instante em que os sistemas sentem que seus comprimentos de correlação são finitos.

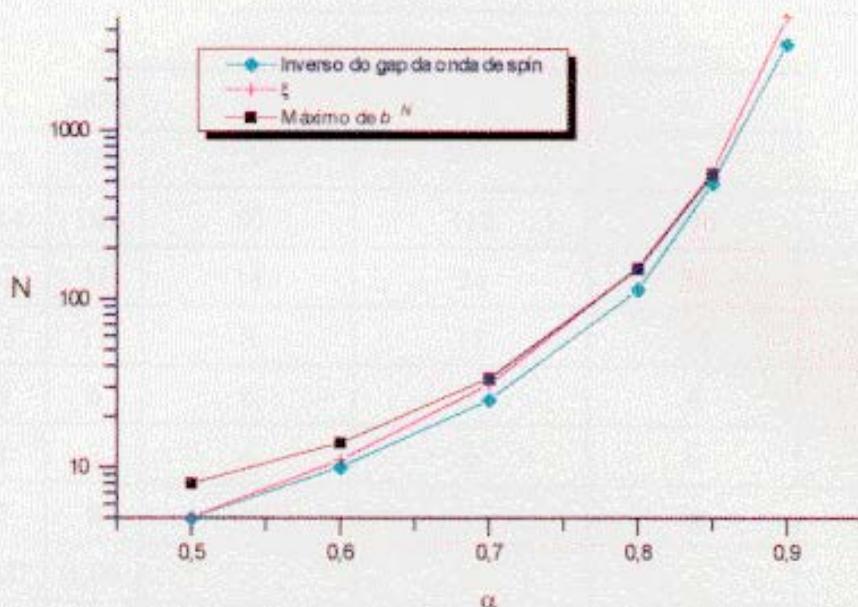


Figura 4-19: comparação entre os  $N$  correspondentes aos máximos da figura 4-13, o inverso do gap da onda de spin e a função  $\xi$ .

Como dissemos no capítulo 1, usualmente se coloca que o comprimento de correlação da hamiltoniana de Heisenberg-Ising é o inverso do gap da onda de spin. O comprimento de correlação do modelo de 6-vértices é a função  $\xi = \frac{\zeta}{2}$  (veja capítulo 1). A pergunta que podemos fazer é se essas definições para o comprimento de correlação correspondem ou não à definição qualitativa que colocamos anteriormente.

Nas figura 4-19 e 4-20, vemos que o inverso do gap da onda de spin é menor que nossas estimativas para o comprimento de correlação.

Na tabela 4.3.2 vemos que a medida que nos aproximamos do ponto isotrópico nossas estimativas vão se tornando cada vez melhores. A pequena piora no caso  $\alpha = 0,85$  pode ser justificada pela introdução de erros numéricos devidos a estarmos trabalhando com cadeias muito grandes.

$\alpha$	$\frac{1}{G_2^\infty}$	$\xi$	desvio de 1%	desvio de 2,5%	desvio de 5%	"máximo" de $b$
1	$\infty$	$\infty$	-	-	-	-
0,9	3300	4838	-	-	-	-
0,85	490	570	-	-	-	552
0,8	114	154	36	112	176	152
0,7	25	31	14	24	34	34
0,6	10	11	8	11	14	14
0,5	5	5	6	7	8	8
0,4	3	3	4	5	6	-
0,3	2	2	-	-	4	-
0,2	1,60	1,05	-	-	-	-
0,1	1,24	0,62	-	-	-	-
0	1,00	0	-	-	-	-

Tabela 4.3.1 - estimativa para o comprimento de correlação em comparação com  $\frac{1}{G_2^\infty}$  e  $\xi$ .

Da tabela 4.3.2, vemos que a função  $\xi(\alpha)$  se aproxima muito bem de nossas estimativas para o comprimento de correlação. Isto está de acordo com o trabalho de Mizuta, Nagao e Wadati [24]. Segundo este trabalho o comprimento de correlação do modelo de 6-vértices é igual ao comprimento de correlação da cadeia XXZ. Ou seja, o comprimento de correlação da Hamiltoniana de Heisenberg-Ising é dada por:

$$\xi = -\frac{1}{2} \frac{1}{\ln \left[ 2e^{-\frac{\gamma}{2}} \prod_{n=0}^{\infty} \left( \frac{1+e^{-2\gamma(2n+2)}}{1+e^{-2\gamma(2n+1)}} \right)^2 \right]} = \frac{\zeta}{2}, \text{ onde } \gamma = \operatorname{arccosh} \left( \frac{1}{\alpha} \right).$$

$\alpha$	razão entre $\frac{1}{G_2^\infty}$ e o "máximo" de b	razão entre $\xi$ e o "máximo" de b
0,85	0,89	0,97
0,8	0,75	0,99
0,7	0,74	0,91
0,6	0,71	0,79
0,5	0,63	0,63

Tabela 4.3.2 - comparação entre uma estimativa para o comprimento de correlação e as funções  $\frac{1}{G_2^\infty}$  e  $\xi$ .

Não podemos deixar de ressaltar que o inverso do gap da onda de spin, também tem um comportamento muito similar ao da função  $\xi$  à medida que nos afastamos do limite de Ising, e assim, constitui uma boa maneira de se estimar o comprimento de correlação do modelo de Heisenberg-Ising sem recorrer a forma explícita da função  $\xi$ .

Uma resposta numérica para a pergunta de qual função constitui uma melhor estimativa para o comprimento de correlação poderia ser dada pelo estudo do caso  $\alpha = 0,9$ , já que para este caso existe uma diferença muito grande entre as funções  $\xi$  e  $\frac{1}{G_2^\infty}$ . Assim, se pudermos calcular cadeias da ordem de 4000 sítios, poderemos responder de forma definitiva qual função melhor representa o comprimento de correlação da cadeia XXZ. Com nossas condições atuais, o tempo computacional para isso seria extremamente alto, tornando inviável este cálculo.

A questão final que podemos levantar é exatamente a inversão do raciocínio de tudo que fizemos até agora. Partindo apenas do estudo de sistemas finitos, fomos capazes de encontrar as leis de escala. Obtemos com bastante precisão o termo exponencial da lei de escala do estado fundamental ( $\zeta$ ). Agora, se supormos o *ansatz* de que este coeficiente está ligado de uma forma bastante simples com o comprimento de correlação, digamos proporcional ( $\xi = \kappa\zeta$ ), e estimarmos de forma independente  $\xi$ , podemos encontrar esta

constante de proporcionalidade e assim obter de maneira bem precisa o comprimento de correlação. Este procedimento é aplicável a qualquer sistema, integrável ou não por *ansatz* de Bethe, e potencialmente pode constituir uma ferramenta interessante para o entendimento de novos sistemas físicos.

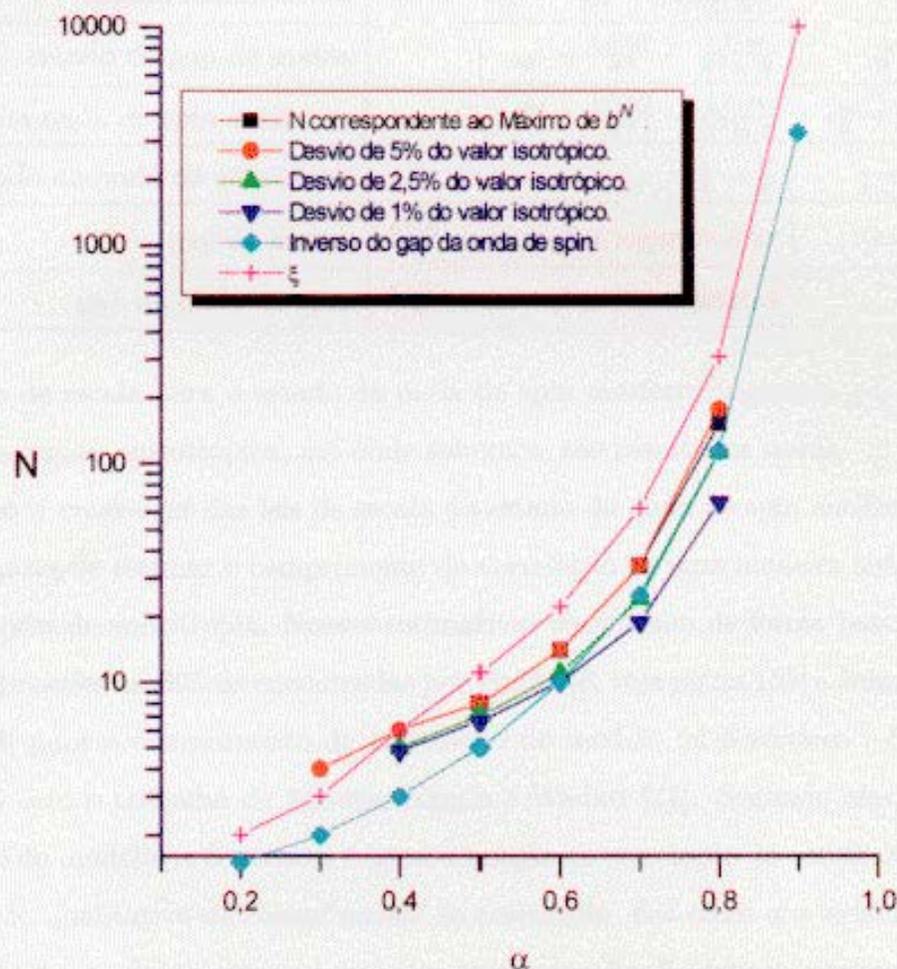


Figura 4-20: estimativa do limite inferior para o comprimento de correlação em comparação com  $\frac{1}{G_2^0}$  e  $\xi$ .

## 4.3 Conclusão

Neste trabalho, desenvolvemos e aplicamos o *ansatz* de Bethe para o modelo de Heisenberg-Ising. Encontramos as auto-energias de cadeias com 4 à 1000 sítios, solucionando as equações do *ansatz*. Usando as idéias de Finite-Size-Scaling encontramos as leis de escala:

	caso isotrópico	caso anisotrópico
estado fundamental	$\epsilon_0^\infty - \frac{0,8225}{N^2} - \frac{0,1355}{N^2(\ln N)^3}$	$\epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_0}{N^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{N}{\zeta}}$
estado do gap de massa	$\epsilon_0^\infty + \frac{4,0722}{N^2} - \frac{1,7148}{N^2 \ln N}$	$\epsilon_0^\infty + \frac{\epsilon_1}{N^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{N}{\zeta}}$
estado da onda de spin antiferro.	$\epsilon_0^\infty + \frac{4,0722}{N^2} - \frac{1,7148}{N^2 \ln N}$	$\epsilon_0^\infty + \frac{G_2^\infty}{N} + \frac{1}{\kappa} \frac{\zeta}{N^3}$
estado da onda de spin ferro.	$\frac{1}{4} - \frac{2}{N}$	$\frac{1}{4} - \frac{1}{N} (1 + \alpha)$
gap de massa	$\frac{4,8947}{N} + \text{correções logarítmicas}$	$(\epsilon_1 - \epsilon_0) \frac{e^{-\frac{N}{\zeta}}}{N^{\frac{1}{2}}}$
gap da onda de spin	$\frac{4,8947}{N} + \text{correções logarítmicas}$	$G_2^\infty + \frac{1}{\kappa} \frac{\zeta}{N^2}$

As leis de escala para o estado da onda de spin antiferromagnética e o gap da onda de spin na região anisotrópica, até onde sabemos, são resultados novos.

Usando o *cross-over* das leis de escala do estado da onda de spin antiferromagnética, fomos capazes de estimar o comprimento de correlação de uma maneira sistemática para vários valores de anisotropia. Nossas estimativas concordam de forma bastante razoável com as expressões analíticas encontradas por Baxter[6, veja pgina 155] e Johnson-Krinsky-McCoy[18] para o comprimento de correlação do modelo de 6-vértices ( $\xi$ ). Isto está de acordo com o trabalho de Mizuta, Nagao e Wadati [24]. Segundo eles, a função de correlação do modelo de 6-vértices é igual a função de correlação da cadeia XXZ. A partir da definição qualitativa de comprimento de correlação, fica claro que existe uma relação entre as leis de escala e o comprimento de correlação. Analisando as expressões analíticas de de Vega e Woynarovich[31], baseadas no *ansatz* de Bethe, vemos que o coeficiente da correção exponencial,  $\zeta$ , é exatamente a metade do comprimento de correlação do modelo de 6-vértices. Apesar de de Vega e Woynarovich[31] conhecerem esta ligação, isto não foi

colocado de forma explícita em seu trabalho.

Finalmente, observamos que podemos inverter este raciocínio. Partindo apenas do estudo de sistemas finitos, fomos capazes de encontrar as leis de escala. Obtivemos com bastante precisão o termo exponencial da lei de escala do estado fundamental ( $\zeta$ ). Agora, se supormos o *ansatz* de que este coeficiente está ligado de uma forma bastante simples ao comprimento de correlação, digamos proporcional ( $\xi = \kappa\zeta$ ), e estimarmos de forma independente  $\xi$  (das formas propostas no capítulo 4 por exemplo), podemos encontrar esta constante de proporcionalidade e assim obter de maneira bem precisa o comprimento de correlação. Este procedimento é aplicável a qualquer sistema, integrável ou não por *ansatz* de Bethe, e potencialmente pode constituir uma ferramenta interessante para o entendimento de novos sistemas físicos. Este tipo de procedimento, até onde sabemos, ainda não foi aplicado a nenhum outro sistema.

# Apêndice A

## Métodos de Extrapolação

### A.1 Método de Shank e VBS

O método de extrapolação mais simples que temos é o método de Shank.

Considere uma sequência monotônica de números  $A_n$ , que acreditamos ter um ponto de acumulação  $A$ .  $(A_n - A)$  é uma outra sequência monotônica com limite zero,

$$f_n = A_n - A.$$

Se considerarmos três termos consecutivos da sequência  $f_n$ , podemos gerar uma nova sequência,  $h_n$ , que converge a 1 ainda mais rápido que a sequência  $f_n$  converge a 0.

$$g_n = \frac{f_{n+1}}{f_n},$$
$$h_n = \frac{g_{n+1}}{g_n}.$$

Assumimos, então, a igualdade:

$$h_n = 1.$$

e, lembrando as definições, temos uma equação de primeira ordem em A:

$$\frac{(A_{n-2} - A)(A_n - A)}{(A_{n+1} - A)^2} = 1,$$

$$A(n) = \frac{A_{n+2}A_n - A_n^2}{A_{n+2} + A_n - 2A_{n+1}}.$$

Isto gera uma nova sequência de números que está mais próxima do valor limite A que a sequência original  $A_n$ .

No mesmo espírito do método de Shank, temos o algoritmo VBS.

Considere as equações:

$$\begin{aligned} P_n^{m+1} &= P_n^m + \frac{1}{Q_n^m - Q_{n-1}^m}, \\ Q_n^m &= \alpha_m Q_n^{m-1} + \frac{1}{P_{n+1}^m - P_n^m}, \\ \alpha_m &= -\frac{1 - (-1)^m}{2}. \end{aligned}$$

onde  $Q_n^{-1} = 0$  e  $P_n^0 = A_n$ . Cada nova sequência de P estará mais próxima do limite da sequência original. Como caso especial, se colocarmos  $\alpha = 0$ , obteremos novamente o algoritmo de Shank.

Mais detalhes sobre esses métodos de extrapolação podem ser encontrados em [5].

## A.2 Método de Taylor

No parágrafo anterior vimos dois métodos padrões de extrapolação de sequências numéricas. Contudo, note que nos dois casos fazemos o produto de dois termos da sequência inicial. Caso nossa sequência inicial já esteja muito próxima do seu limite (mais que metade da precisão numérica da máquina), estes algoritmos de extrapolação não melhorarão esta

sequência. Pensando nisso, propomos um método de extrapolação baseado na série de Taylor.

Considere uma sequência monotônica  $A_n$ , com limite  $A$ . Se pudermos pensar que existe uma função  $f$  que interpola os termos da série  $A_n$ , tal que:

$$f\left(\frac{1}{n}\right) = A_n.$$

Com essa definição no limite de  $n \rightarrow \infty$ , obtemos que  $f(0) = A$ . Para  $n$  suficientemente grande, podemos expandir a função  $f$  em sua série de Taylor.

$$f\left(\frac{1}{n}\right) = f(0) + \frac{f'(0)}{n} + \frac{f''(0)}{2n^2} + \frac{f'''(0)}{6n^3} + \dots$$

Truncando a série na ordem  $j$  e tomando  $j$  termos consecutivos da sequência inicial, temos um sistema linear de grau  $j$  que podemos resolver.

$$\begin{bmatrix} A_n \\ A_{n+1} \\ A_{n+2} \\ \dots \\ A_{n+j} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{n} & \frac{1}{2n^2} & \dots & \frac{1}{j!n^j} \\ 1 & \frac{1}{n+1} & \frac{1}{2(n+1)^2} & \dots & \frac{1}{j!(n+1)^j} \\ 1 & \frac{1}{n+2} & \frac{1}{2(n+2)^2} & \dots & \frac{1}{j!(n+2)^j} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \frac{1}{n+j} & \frac{1}{2(n+j)^2} & \dots & \frac{1}{j!(n+j)^j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(0) \\ f'(0) \\ f''(0) \\ \dots \\ f^j(0) \end{bmatrix}$$

Com isso geramos uma nova sequência  $A'_n = f(0)$ , que será mais próxima do limite  $A$  que a sequência original. Note que para acharmos essa nova sequência não precisamos elevar ao quadrado nenhum termo da sequência original. O erro numérico que existe agora se encontra na inversão da matriz.

# Bibliografia

- [1] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag (1995).
- [2] M. N. Barber, *Aust. J. Phys.* **26**, 483 (1973).
- [3] M. N. Barber e M. E. Fisher, *Annals of Physics* **77**, 1 (1973).
- [4] M.N. Barber, *Journal of Physics A* **10**, 1335 (1977).
- [5] M. N. Barber, *Phase Transitions* vol **8** (C. Domb e M. S. Green, eds), Academic Press, London (1983).
- [6] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press (1982).
- [7] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [8] B-D Børjel e S Meißner, *Journal of Physics A* **26**, 3351 (1995).
- [9] Z. Chang, *Physics Reports*, **V262**, N 3&4 (1995).
- [10] L. Faddeev e L.A. Takhtajan, *Physics Letters* **85A**, 375 (1981).
- [11] L Faddeev, *Les Houches* ed. J. B. Zuber e R. Stora, 561 (1984).
- [12] L. Faddeev, *Lecture Notes in Physics* vol **242**, 158 (1985).
- [13] A. E. Ferdinand e M. E. Fisher, *Physical Review* **185**, 832 (1969).

- [14] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics - A Set of Lectures*, Addison Wesley (1972).
- [15] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems*, Addison-Wesley Pub. Company (1991).
- [16] C. Itzykson e J. M. Drouffe, *Statistical Field Theory Vol.1*, Cambridge Monographs in Mathematical Physics (1989).
- [17] M. Jimbo (editor), *Yang-Baxter Equation in Integrable Systems*, Advanced Series in Mathematical Physics Vol. 10, World Scientific (1990).
- [18] J. D. Johnson, S. Krinsky e B. M. McCoy, *Physical Review A* **V8 N5**, 2526 (1973).
- [19] P. Kulish e E. Sklyanin, *Physics Letters* **70A**, 463 (1979).
- [20] J. B. Kogut, *Rev. Mod. Phys.* **51**, 659 (1979).
- [21] P. Kulish e E. Sklyanin, *Lecture Notes in Physics* **vol 151**, 61 (1982).
- [22] L. Landau e E. Lifchitz, *Mecânica*, MIR (1966).
- [23] P. Martin, *Potts Models and Related Problems in Statistical Mechanics*, World Scientific (1991).
- [24] H. Mizuta, T. Nagao e M. Wadati, *Journal of Physical Society of Japan* **V63 N11**, 3951(1994).
- [25] D. Medeiros, *Efeitos de Tamanho em Cadeias de Heisenberg-Ising com interações Antiferromagnéticas*, tese de doutoramento do IFGW (1990).
- [26] R. Orbach, *Physical Review* **112**, 309 (1958).
- [27] R. Orbach, *Physical Review* **115**, 1181 (1959).
- [28] R. Shankar, *Review in Modern Physics* **66**, 129 (1994).
- [29] E. Sklyanin, *J. Phys. A: Math. Gen.* **21**, 2375 (1988).

- [30] L.A. Takhtajan, *Lecture Notes in Physics* vol **242**, 175 (1985).
- [31] H.J. de Vega e F. Woynarovich, *Nuclear Physics B* vol **251**, 439 (1985).
- [32] G. Wilson e J. Kogut, *Physics Reports*, **V12C**, N 2 (1974).
- [33] F. Woynarovich e H-P ECKLE, *Journal of Physics A* **20**, L97 (1987).
- [34] C. N. Yang e C. P. Yang, *Physical Review* **147**, 303 (1966).
- [35] C. N. Yang e C. P. Yang, *Physical Review* **150**, 321 (1966).
- [36] C. N. Yang e C. P. Yang, *Physical Review* **150**, 327 (1966).
- [37] C. N. Yang e C. P. Yang, *Physical Review* **151**, 258 (1966).
- [38] C. N. Yang e M. L. Ge (editores), *Braid Group, Knot Theory and Statistical Mechanics*, Advanced Series in Mathematical Physics Vol. 9, World Scientific (1989).