



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA JÚLIO DE
MESQUITA FILHO (UNESP)

Guilherme Eduardo Lopes Pexe

**Transições de fase quânticas no modelo de
Ising anisotrópico com interações de
segundos vizinhos em uma dimensão**

Brasil, Bauru
5 de fevereiro de 2023

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA JÚLIO DE
MESQUITA FILHO (UNESP)

Guilherme Eduardo Lopes Pexe

Transições de fase quânticas no modelo de
Ising anisotrópico com interações de
segundos vizinhos em uma dimensão

Trabalho apresentado à banca do Departamento de Física da Faculdade de Ciências com propósito de obter o Título de Graduação Bacharelado em Física de Materiais pela Universidade Estadual Paulista "Júlio De Mesquita Filho", sob orientação do Prof.Dr: André Luiz Malvezzi.

5 de fevereiro de 2023

P514t Pexe, Guilherme Eduardo Lopes
Transições de fase quânticas no modelo de Ising anisotrópico com
interações de segundos vizinhos em uma dimensão / Guilherme
Eduardo Lopes Pexe. -- Bauru, 2023
28 p. : il., tabs.

Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado - Física) -
Universidade Estadual Paulista (Unesp), Faculdade de Ciências,
Bauru
Orientador: André Luiz Malvezzi

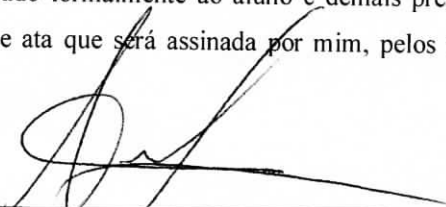
1. Modelo ANNNI. 2. Transições de fase quânticas. 3. Magnetismo.
I. Título.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Biblioteca da Faculdade de
Ciências, Bauru. Dados fornecidos pelo autor(a).

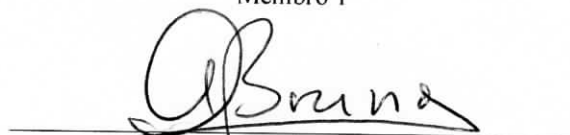
Essa ficha não pode ser modificada.

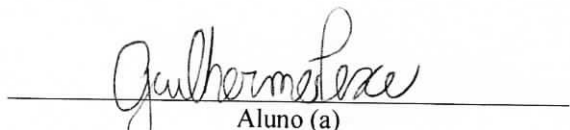
ATA DE DEFESA PÚBLICA DO TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Aos 13 dias do mês de Fevereiro de 2023, às 14:00 hs, em sessão pública em formato virtual via Google Meet, na presença da Banca Examinadora presidida pelo **Prof. André Luiz Malvezzi** e composta pelos examinadores **Prof. Alexys Bruno Alfonso** e **Prof. Pablo Antonio Venegas Urenda**, o aluno **Guilherme Eduardo Lopes Pexe** apresentou o trabalho de conclusão de curso intitulado: “**Transições de fase quânticas no modelo de Ising anisotrópico com interações de segundos vizinhos em uma dimensão**”, como requisito curricular indispensável para a integralização do curso de Física – Bacharelado em Física de Materiais. Após reunião em sessão reservada, a Banca Examinadora deliberou e decidiu pela **aprovação** do referido trabalho, divulgando o resultado formalmente ao aluno e demais presentes e eu, na qualidade de Presidente da Banca, lavrei a presente ata que será assinada por mim, pelos demais examinadores e pelo aluno.


Orientador


Membro 1


Membro 2


Aluno (a)

Transições de fase quânticas no modelo de Ising anisotrópico com interações de segundos vizinhos em uma dimensão

Guilherme Eduardo Lopes Pexe

5 de fevereiro de 2022

Resumo

Neste trabalho foi estudado o modelo Ising anisotrópico com interações de segundos vizinhos. O modelo apresenta um rico comportamento de fases, com a presença de regiões do espaço de parâmetros com transições de primeira e segunda ordens. O estudo será feito por meio de diagonalização numérica do modelo hamiltoniano em cadeias finitas. O objetivo principal do estudo é determinar o diagrama de fases quânticas presentes no modelo através do método de Escala de Tamanho Finito, e caracterizar cada uma das fases, através da medida de suas propriedades magnéticas, utilizando as funções de correlação do spin no espaço real.

Palavras-chave: Modelo ANNNI, Transições de fase quânticas, Magnetismo, Finite-Size-Scaling, Métodos não-perturbativos.

Transições de fase quânticas no modelo de Ising anisotrópico com interações de segundos vizinhos em uma dimensão

Guilherme Eduardo Lopes Pexe

5 de fevereiro de 2022

Abstract

In this work, the anisotropic Ising model with remnants of second neighbors was studied. The model presents a rich phase behavior, with the presence of regions of the parameter space with first and second order transitions. The study will be done through numerical diagonalization of the hamiltonian model in finite chains. The main objective of the study is to determine the quantum phase diagram presented in the model through the Finite Size Scale method, and to characterize each of the phases, through the measurement of their magnetic properties, using the spin dynamics functions in real space.

Keywords: ANNNI model, Quantum phase transitions, Magnetism, Finite-Size-Scaling, Non-perturbative methods.

Sumário

Sumário	7
1 OBJETIVOS	8
2 INTRODUÇÃO	9
2.1 Transição de fase	9
2.2 Transições de fase quânticas	11
3 MODELO ANNNI	15
4 MÉTODOS	17
4.1 Escala de tamanho finito (FSS)	17
4.2 Propriedades Magnéticas	18
5 RESULTADOS	19
6 CONCLUSÃO	27
REFERÊNCIAS	28

1 Objetivos

O objetivo principal deste trabalho é estudar as transições de fase quânticas presentes no modelo de Ising anisotrópico com interações de segundos vizinhos (ANNNI), utilizando métodos numérico-computacionais, como a diagonalização da Hamiltoniana correspondente em cadeias finitas e o método de escala de tamanho finito (FSS). Determinando o diagrama de fases quânticas do modelo assim como caracterizar cada uma das fases através da determinação de suas propriedades magnéticas, utilizando as funções de correlação de spin no espaço real e os fatores de estrutura magnéticos.

2 Introdução

2.1 Transição de fase

A todo momento, presenciamos transições de fase acontecendo. O exemplo mais clássico é a transição sólido-líquido da água, controlada pela temperatura e apresentando algumas características peculiares como a descontinuidade na função densidade. Do mesmo modo a matéria em geral está sujeita a transições de fase, que são caracterizadas por meio de mudanças em determinadas quantidades macroscópicas. Uma transição de fase ocorre quando uma variável termodinâmica, ou parâmetro intensivo, responsável pela transição, é variado. E é neste ponto onde ocorrem singularidades em determinadas grandezas físicas [1].

Caso a transição de fase seja do tipo ordem-desordem, é possível sempre associá-la a um parâmetro de ordem, respeitando as simetrias do sistema, portanto a fase ordenada é diferente de zero e a fase desordenada é nula. Assim, construímos um formalismo eficiente para saber em qual fase o sistema se encontra e onde está localizado o ponto de transição. Do ponto de vista experimental, é comum ter como variável termodinâmica a temperatura, pressão, campos magnéticos e elétricos, dopagem, entre outros, que desencadeiam em uma transição de fase.

As transições de fase podem ser classificadas em descontínuas ou de primeira ordem, quando o parâmetro de ordem tende a zero de forma descontínua, apresentando saltos, e como contínuas ou de segunda ordem, quando o parâmetro de ordem tende a zero de forma contínua. As transições de primeira ordem estão associadas à coexistência de fases, o que é um reflexo da descontinuidade na entropia, como citado o exemplo da transição de fase sólido-líquido da água à temperatura de fusão do gelo, com descontinuidade na função que representa a densidade entre as duas fases. Por outro lado, a transição de fase de segunda ordem, que acontece no chamado ponto crítico, a coexistência de fases não acontece. Na verdade, as duas fases tornam-se iguais. É o caso da transição ferromagnética-paramagnética induzida pela temperatura, e o ponto terminal da linha de transição de primeira ordem de um fluido simples. Como neste trabalho trataremos de sistemas magnéticos, consideramos as grandezas na correspondente linguagem magnética.

Podemos também associar uma função de correlação ao parâmetro de ordem, de modo que longe do ponto crítico esta função decai exponencialmente e, próximo da transição de fase, decai como lei de potência, em função da distância espacial na rede, com um comprimento de correlação ξ , o qual mede o tamanho médio dos blocos correlacionados. Quando a transição é de primeira ordem, o correspondente comprimento de correlação é finito. No entanto, se a transição é de segunda ordem, essa grandeza diverge no

ponto crítico, deixando inclusive o sistema invariante por escala e é nessa vizinhança que observamos os fenômenos críticos. Outras grandezas físicas, provenientes de derivadas da energia livre, como por exemplo calor específico e susceptibilidade magnética, apresentam singularidades no ponto crítico, com comportamento assintótico como lei de potência na vizinhança da região crítica, sendo que a cada uma delas está associada um expoente crítico. Em geral, define-se seis expoentes críticos $\beta, \delta, \gamma, \alpha, \nu, \eta$, que podem ser obtidos tanto teoricamente como experimentalmente, e que estão relacionados com as seguintes grandezas termodinâmicas [2]:

- Magnetização

$$m(t, H) = - \left(\frac{\partial g}{\partial H} \right)_T \sim \begin{cases} (-t)^\beta, H = 0, t \rightarrow 0^- \\ (H)^{1/\delta}, T = T_c, H \rightarrow 0^+ \end{cases} \quad (2.1)$$

- Susceptibilidade magnética

$$\chi(t) = - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial H^2} \right)_T \sim |t|^{-\gamma}, H = 0, t \rightarrow 0^\pm \quad (2.2)$$

- Calor específico

$$c(t) = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \right)_H \sim |t|^{-\alpha}, H = 0, t \rightarrow 0^\pm \quad (2.3)$$

- Função de correlação

$$\Gamma(r) = \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}}, \xi \sim |t|^{-\nu}, \quad (2.4)$$

onde $g = g(T, H)$ é a energia livre de Gibbs por partícula, T a temperatura absoluta, H o campo magnético externo, $t = (T - T_c)/T_c$ a temperatura reduzida, Γ é a função de correlação como função da distância r , e d a dimensão espacial da rede cristalina.

Uma característica interessante é que esses expoentes não são, de fato, independentes entre si, pois obedecem, rigorosamente, a certas desigualdades, as chamadas leis de escala[1], algumas são dadas por

$$\begin{aligned} \alpha + \beta(1 + \delta) &\geq 2 \text{ (desigualdade de Griffiths)} \\ \beta\delta &\leq \beta + \gamma \text{ (desigualdade de Widom)} \\ \alpha &= 2 - \nu d \text{ (lei de Hiperescala de Josephson)} \\ \alpha + 2\beta + \gamma &\geq 2 \text{ (desigualdade de Rushbrooke)} \end{aligned}$$

Quando diferentes sistemas, do ponto de vista das interações microscópicas, apresentam um mesmo conjunto de expoentes críticos diz-se que eles pertencem à mesma classe de universalidade [1]. Esses expoentes dependem da dimensionalidade da rede cristalina e da dimensionalidade e simetrias do parâmetro de ordem.

Outro aspecto marcante e importante das transições de fase é a quebra espontânea de simetria. Por exemplo, na transição de fase ferromagnética-paramagnética a fase ferromagnética (ordenada) possui menor simetria em comparação a fase paramagnética (desordenada). A quebra espontânea de simetria é um fenômeno que pode acontecer à temperatura finita e quando o parâmetro de ordem não comuta com o hamiltoniano. Por definição, um sistema tem quebra de simetria espontânea se o parâmetro de ordem se mantém diferente de zero mesmo quando o campo de ordenamento é levado a zero [3].

Uma vez que trataremos de sistemas frustrados mais adiante, é importante destacar o que acontece com esses sistemas do ponto de vista da teoria dos expoentes críticos. A maioria dos experimentos com materiais frustrados mostra que estes podem exibir leis de escala, no entanto com expoentes críticos não universais, ou seja, variando de um material para outro. Além disso, são observados comportamentos como alguma lei de escala sendo violada para alguns materiais, dimensão anômala negativa. Em todo caso, toda a criticalidade do sistema pode ser descrita a partir dos seus expoentes críticos [4].

Até aqui, foram apresentados aspectos básicos sobre o fenômeno de transições de fase clássicas ou térmicas. Vamos agora nos concentrar nas transições de fase quânticas que acontecem à temperatura nula, que é objeto de estudo deste trabalho.

2.2 Transições de fase quânticas

Quando uma transição de fase ocorre à temperatura nula, chamamos de transição de fase quântica. O interesse por essas transições em sistemas de spin fortemente correlacionados está relacionado ao surgimento de possíveis transições entre novas fases quânticas, como fases de líquidos de spin [5]. Em $T = 0$, não temos flutuações térmicas, portanto, sob certas condições, a ordem do sistema pode ser completamente interrompida por flutuações quânticas. Do ponto de vista teórico, para que ocorra a transição, a magnitude dessas flutuações deve ser controlada por algum parâmetro g do hamiltoniano. Seja o hamiltoniano:

$$H = H_0 + gH_1 \quad (2.5)$$

onde g é um parâmetro de controle adimensional e H_0 e H_1 têm estados quânticos diferentes que competem por meio de g . Em geral, H_0 e H_1 não comutam, ou seja, $[H_0, H_1] \neq 0$. Isso significa que existe uma diferença de energia entre o estado fundamental e o estado excitado. À medida que o sistema se aproxima do limite termodinâmico, essa diferença diminui até o limite onde o estado excitado se torna o estado fundamental em $g = g_c$.

Quando isso acontece, a energia livre do sistema torna-se não analítica em g_c , o que caracteriza a transição de fase quântica neste ponto. Essa transição pode ocorrer no limite dos cruzamentos de energia ou nos cruzamentos efetivos, conforme mostrado no diagrama da Figura 1. Se a singularidade do estado fundamental surge de um cruzamento eficiente, como mostrado em 1(a), temos uma transição de fase quântica de primeira ordem que é possível mesmo em sistemas finitos. Por outro lado, se os níveis de energia não se cruzam em um sistema finito, como mostrado em 1(b), mas se aproximam do toque quando nos aproximamos do limite termodinâmico, então no limite do sistema finito temos uma transição de fase de segunda ordem [5, 2]. Seja Δ a diferença entre a energia do estado fundamental e a energia do primeiro estado excitado, onde em geral Δ vai a zero em função do parâmetro g na forma

$$\Delta \sim |g - g_c|^{\nu z}, \quad (2.6)$$

onde νz funciona como um expoente crítico e é normalmente universal. Podemos relacionar Δ com o comprimento de correlação característico do sistema ξ , que para transições de segunda ordem diverge

$$\xi \sim |g - g_c|^{-\nu} \quad (2.7)$$

de forma que

$$\Delta \sim \xi^{-z} \quad (2.8)$$

onde z é o chamado índice de criticidade dinâmica. Ou seja, quando o comprimento da correlação diverge, a diferença de energia entre o estado fundamental e o estado excitado torna-se zero.

No entanto, para identificar essas transições de fase, precisamos verificar singularidades da energia do estado fundamental em $T = 0$. Como não temos acesso a tais temperaturas em laboratório, embora possamos chegar muito perto delas, o desafio é determinar a influência das transições de fase quânticas, no comportamento físico em temperaturas finitas.

Assim, considerando uma transição de fase em alguma temperatura finita, a descrição da mecânica quântica torna-se importante quando $\hbar\omega_c \gg k_B T$, onde $\hbar\omega_c$ é a escala de energia típica para flutuações no parâmetro de ordem, e $k_B T$ é a energia térmica. Essa comparação entre as energias nos levou a descobrir um comportamento interessante próximo ao ponto crítico quântico.

Para observar esse comportamento, temos que considerar dois casos, dependendo se o sistema pode manter a ordem de longo alcance em temperatura finita. Na Fig. 2(a), encontramos o caso de ordem apenas em $T = 0$. Como não podemos obter zero absoluto em experimentos reais, precisamos saber a qual região nossas conclusões teóricas sobre transições de fase quânticas estão relacionadas. Temos assim três regimes: (i) desordem clássica, para $g < g_c$, onde a ordem existe apenas em $T = 0$; (ii) desordem quântica,

para ($g > g_c$), onde as flutuações quânticas destroem a sequência de longo alcance; (iii) quântico crítico, a região próxima ao ponto crítico quântico $g = g_c$, onde

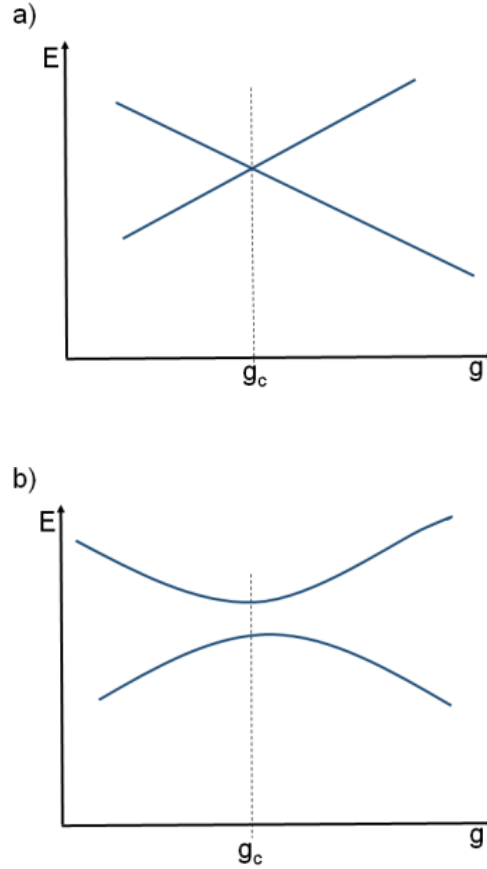


Figura 1 – Representação esquemática das transições de fases quânticas através do cruzamento dos níveis de energia E do estado fundamental e do estado excitado, no ponto crítico quântico $g = g_c$. Em (a) temos o cruzamento simples dos níveis de energia, sinalizando uma transição de primeira ordem e em (b) o cruzamento só acontecerá no limite termodinâmico, caracterizando assim uma transição de segunda ordem [5, 2].

As flutuações térmicas e quânticas são importantes onde os limites dependem do ajuste do parâmetro de ordem g através da condição $k_B T > \hbar w_c \propto |g - g_c|^{-\nu}$, portanto, a criticalidade pode ser perdida se as flutuações térmicas forem suficientemente intensas (no caso dos ímãs, isso acontece quando $k_B T$ é da ordem da energia de troca). Por outro lado, na Figura 2(b), temos o caso ordenado de longo alcance da temperatura finita. Aqui, o ponto crítico quântico é o ponto final da linha crítica de transições com $T_c \neq 0$. As flutuações térmicas dominam a região sombreada em torno da linha crítica e diminuem à medida que nos aproximamos do ponto crítico quântico. Em geral, como mostrado na Figura 2, podemos abordar o ponto crítico quântico de duas maneiras: uma é seguir a direção $g \rightarrow g_c$ quando $T = 0$, e a outra é fazer $T \rightarrow 0$ quando $g = g_c$. É esta última que nos permite estudá-la de um ponto de vista experimental. Assim, as flutuações térmicas são responsáveis pela transição de fase no modelo clássico e, como essas flutuações desaparecem em $T = 0$, os sistemas quânticos têm suas transições de fase a partir das flutuações quânticas que emergem do princípio de incerteza de Heisenberg.

As transições de fases quânticas são um tópico de grande interesse na área de matéria condensada, pois apesar de não podermos acessar experimentalmente $T = 0$, a presença do ponto crítico quântico pode ser a chave para compreendermos alguns problemas importantes, como por exemplo os supercondutores de altas temperaturas [5][6].

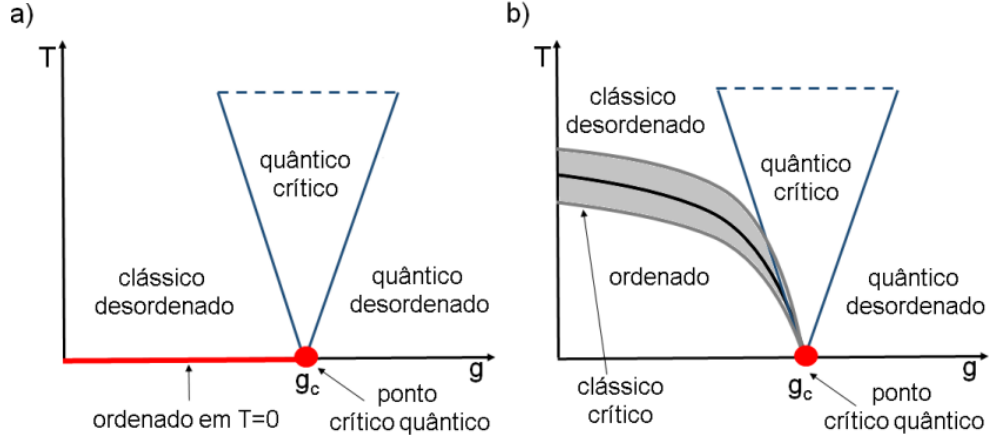


Figura 2 – Representação esquemática de um diagrama de fases no plano $g - T$, na vizinhança do ponto crítico. Em (a) temos um sistema que possui ordem apenas em $T = 0$. A linha em vermelho representa a fase ordenada à temperatura nula. Em (b) temos uma transição de fase clássica acontecendo ao longo da linha crítica em preto, a área sombreada em torno da linha crítica é a região onde as flutuações térmicas dominam. Os círculos em vermelho são os pontos críticos quânticos de cada transição em $g = g_c$ e as áreas delimitadas pelas linhas em azul são as regiões onde ambas as flutuações térmicas e quânticas são relevantes. A linha tracejada em azul delimita a região onde esse comportamento é universal [5, 2].

3 Modelo ANNNI

No final dos anos cinquenta e no início dos anos sessenta, estruturas periódicas moduladas espacialmente foram observadas experimentalmente em sistemas magnéticos e ferroelétricos. Mais tarde ficou claro que essas estruturas surgem da interação competitiva de momentos de dipolo magnético e elétrico e podem ser imitadas por modelos magnéticos com interações concorrentes regulares (frustração). O modelo mais popular no qual os efeitos da frustração regular no modelo de spin (clássico) tem sido estudado extensivamente é o modelo de Ising anisotrópico com interações de segundos vizinhos (*Anisotropic Next Nearest Neighbour Ising*, ANNNI, do inglês[7],[8],[9]). O modelo ANNNI clássico é descrito por um sistema de spin Ising com interações do vizinho mais próximo ao longo de todas as direções da rede (x , y e z), bem como uma interação concorrente do segundo vizinho mais próximo em uma direção axial [10]. A competição regular ou frustração aqui dá origem a muitas estruturas de spin moduladas. Dependendo da interação, muitas fases moduladas comensuráveis e incomensuráveis aparecem em tais sistemas, que mostram um rico diagrama de fases [8]. É plausível mencionar que outros modelos de Ising regularmente frustrados também podem ser construídos: por exemplo, o modelo ANNNI pode ser estendido para incluir frustração ao longo de dois ou mais eixos ou pode haver três ou mais termos de interação de spin. Além disso, pode-se construir modelos Ising frustrados com outras interações vizinhas ou outros modelos frustrados não-Ising, como o modelo de relógio quiral de três estados [8].

No entanto, o modelo de Ising mais simples com frustração regular é o modelo ANNNI, sendo possível espelhar as propriedades de sistemas magnéticos reais, bem como muitos outros sistemas com estruturas moduladas, como em ferroelétricos, ligas binárias, etc. Estamos interessados aqui na estabilidade de tais fases moduladas e nas transições de fase impulsionadas por flutuações quânticas em temperatura zero. Novamente, pode-se ter uma flutuação quântica sintonizável induzida pela presença de um campo transversal. Consideramos, portanto, as propriedades do estado fundamental do modelo ANNNI em um campo transversal à temperatura zero. Aqui, espera-se que a presença de frustração dê origem a interessantes fases quânticas. O modelo pode ser descrito pelo seguinte hamiltoniano:

$$H = -J \sum_{j=1}^L \left(\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - \kappa \sigma_j^z \sigma_{j+2}^z + g \sigma_j^x \right), \quad (3.1)$$

sendo σ_j^a , com $a = x, y, z$, as matrizes de Pauli

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

$$\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

que atuam no sítio j em uma rede (cadeia) unidimensional com L sítios. Portanto, para uma cadeia com L sítios, o hamiltoniano H atua sobre um espaço de Hilbert, que é o produto tensorial de L espaços bidimensionais. A matriz hamiltoniana resultante tem dimensão $2 \times 2 \times \dots \times 2 = 2^L$. De fato, cada operador de spin σ_j^a também atua em todo espaço de Hilbert e pode ser formalmente escrito como

$$\overbrace{I \otimes I \otimes \dots \otimes I}^{j-1} \otimes \sigma_j^a \otimes \overbrace{I \otimes I \otimes \dots \otimes I}^{L-j} \quad (3.5)$$

onde o operador I é uma matriz identidade 2×2 . Condições de contorno periódicas são aplicadas, ou seja, $\sigma_{L+1}^a = \sigma_1^a$. A constante de acoplamento $J(> 0)$ da interação ferromagnética do primeiro vizinho define a escala de energia ($J = 1$), enquanto $\kappa(> 0)$ e $g(> 0)$ são as constantes de acoplamento adimensionais associadas à interação do segundos vizinhos e o campo magnético transversal, respectivamente.

O diagrama de fases do estado fundamental do modelo ANNNI exibe quatro fases: fase ferromagnética, antifase, paramagnética e fase flutuante, separadas por três transições de fase quânticas.

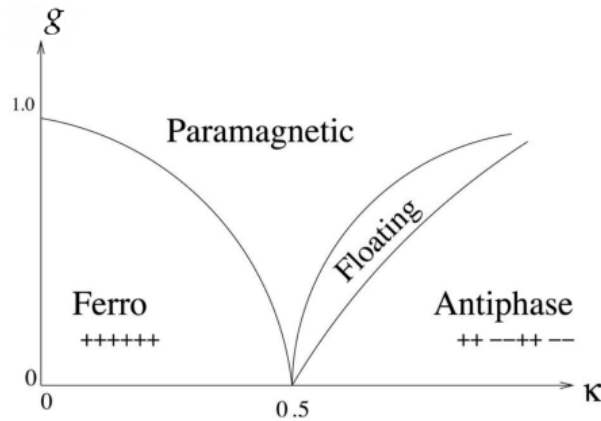


Figura 3 – Diagrama de fases qualitativo com a representação das quatro fases do modelo [10].

A fase ferromagnética é caracterizada por magnetização espontânea uniforme, a antifase quebra a simetria translacional da rede e possui uma ordem de longo alcance com periodicidade em quatro sítios, já a fase paramagnética é desordenada e possui um estado fundamental único que pode ser retratado como rotações apontando predominantemente ao longo da direção do campo. Dentro das três fases descritas até agora, a diferença de energia é finita e todas as funções de correlação decaem exponencialmente. Por outro lado, a fase flutuante é uma fase crítica (sem escala) com ordem de quase-longo-alcance, isto é, decaimento da lei de potência das funções de correlação em grandes distâncias.

4 Métodos

Para determinarmos as propriedades do modelo da Eq. (3.1), foi utilizado o Método de escala de tamanho finito (FSS - do inglês *Finite Size Scaling*[11],[12]). Utilizando o FSS foi possível mapear as linhas de transições de fase através dos pontos críticos, determinando o diagrama de fases.

Nesta seção primeiramente abordamos o método de escala de tamanho finito(FSS) e depois as quantidades físicas calculadas como funções de correlação e fatores estruturais. Uma característica importante deste método é que a equação de Schrödinger independente do tempo (diagonalização da hamiltoniana) é resolvida exatamente, sem a introdução de nenhum método perturbativo.

Como se trata de um problema de elétrons fortemente interagentes, é uma grande vantagem a obtenção da solução exata. Do ponto de vista matemático, a solução da equação de Schrödinger independente do tempo é um problema de autovalores. Em geral, é preciso calcular todos os autovalores e autovetores do hamiltoniano, mas em baixas temperaturas o conhecimento do estado fundamental e dos primeiros estados excitados proporcionam uma visão considerável da física de um determinado sistema.

4.1 Escala de tamanho finito (FSS)

A ideia do Método de Escala de Tamanho Finito foi introduzida por Fisher e Barber [11, 12] para explicar o efeito das singularidades termodinâmicas em variações de tamanho finito. Seja $\Psi(\lambda)$ alguma quantidade física que diverge no limite termodinâmico em um valor crítico (λ_c)

$$\Psi(\lambda) \sim A|\Delta|^{-\Psi} \quad (4.1)$$

$$\Delta\lambda = \frac{(\lambda - \lambda_c)}{\lambda_c} \rightarrow 0, \quad (4.2)$$

onde o comprimento de correlação $\xi \sim |\Delta\lambda|^{-\nu}$ também diverge com o expoente do comprimento de correlação.

A lacuna de energia do hamiltoniano quântico $\Delta(\kappa, g)$ em função dos parâmetros (κ, g) é inversamente proporcional ao comprimento de correlação ξ . Assim, no limite termodinâmico, quando o tamanho da cadeia $L \rightarrow \infty$, temos que a lacuna de energia vai a zero no ponto crítico, $\Delta(\kappa, g) \rightarrow 0$, de forma que obtemos uma singularidade, e o comprimento de correlação diverge, tal que $\xi \rightarrow \infty$. Assim, a localização dos parâmetros do ponto de transição de fase desejados, pode ser feita através do método FSS. No ponto de transição temos que $\xi \approx L$ de forma que obtemos $\frac{L}{\xi} = L \cdot \Delta(\kappa, g) = L \cdot (E_1(\kappa, g) - E_0(\kappa, g)) \rightarrow 1$, onde $E_0(\kappa, g)$ é a energia do estado fundamental e $E_1(\kappa, g)$

é a energia do primeiro excitado calculadas no ponto (κ, g) para uma cadeia de L sítios. Uma estimativa para o ponto crítico (ponto de transição de fase) pode ser obtida quando a função $L \cdot (E_1(\kappa, g) - E_0(\kappa, g))$ coincide para dois tamanhos de cadeias adjacentes, L e $L+1$. Ou seja, do ponto de vista prático, fazemos gráficos da função $L \cdot (E_1(\kappa, g) - E_0(\kappa, g))$ fixando um dos parâmetros e variando o outro. Quando gráficos para duas cadeias de tamanhos adjacentes são sobrepostos o ponto de cruzamento dessas curvas fornece a estimativa do ponto crítico. Repetindo esse processo para sucessivos pares de cadeias cada vez maiores obtemos uma sequência de estimativas que convergirá para o valor do ponto crítico no limite em que $L \rightarrow \infty$.

4.2 Propriedades Magnéticas

Os métodos numéricos são amplamente utilizados em análises de modelos teóricos, como a diagonalização numérica exata que fornece os autoestados possíveis do sistema, como o estado fundamental.

Os métodos numéricos, como FSS e outros, são amplamente utilizados em análises de modelos teóricos como a diagonalização numérica exata, que fornece o espectro de energias do sistema. Sabendo o estado fundamental é possível calcular as propriedades magnéticas associadas a cada uma das fases, caracterizadas pelas funções de correlação de spin no espaço real

$$S^{\mu\mu}(r) = \langle S_i^\mu S_{i+r}^\mu \rangle, \quad \mu = x, y, z, \quad (4.3)$$

e seus correspondentes fatores de estrutura magnéticos, pela Transformada de Fourier discreta,

$$\tilde{S}^{\mu\mu}(k) = \frac{1}{L} \sum_{i,j=1}^L e^{ik(i-j)} \langle S_i^\mu S_j^\mu \rangle, \quad \mu = x, y, z, \quad (4.4)$$

assim como suas somas,

$$\tilde{S}(k) = \sum_{\mu=x,y,z} \tilde{S}^{\mu\mu}(k), \quad (4.5)$$

onde $\langle \dots \rangle \equiv \langle \psi_0 | \dots | \psi_0 \rangle$ representa o valor médio no estado fundamental, $S_i^\mu = \frac{1}{2} \sigma_i^\mu$ é a componente do operador de spin atuando no sítio i (onde utilizamos $\hbar = 1$), r é a distância entre os sítios nos quais a correlação está sendo medida e k (em unidades de $2\pi/L$) é o número de onda que caracteriza a periodicidade do ordenamento magnético.

Ressaltando que toda a análise é feita no estado fundamental porque estamos determinando as propriedades puramente quânticas do modelo, ou seja, a temperatura absoluta T é muito baixa de maneira que efeitos térmicos não são relevantes.

5 Resultados

A seguir, apresentamos os resultados obtidos para valores de $\kappa < 0,5$. Foram construídas um total de dez Hamiltonianas correspondentes a dez cadeias distintas de tamanhos $L = 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12$. O parâmetro do campo é fixado e variou-se o parâmetro de interação entre segundos vizinhos κ . O processo de diagonalização foi feito através de métodos computacionais como Fortran, Python e Matlab, para cada uma das matrizes, de forma que se obteve o espectro de energia associado a cada cadeia de tamanho L . A estipulação do ponto de cruzamento foi feita através da superposição entre os gráficos $\kappa \times \Delta E$ das cadeias de tamanho L e $L + 1$.

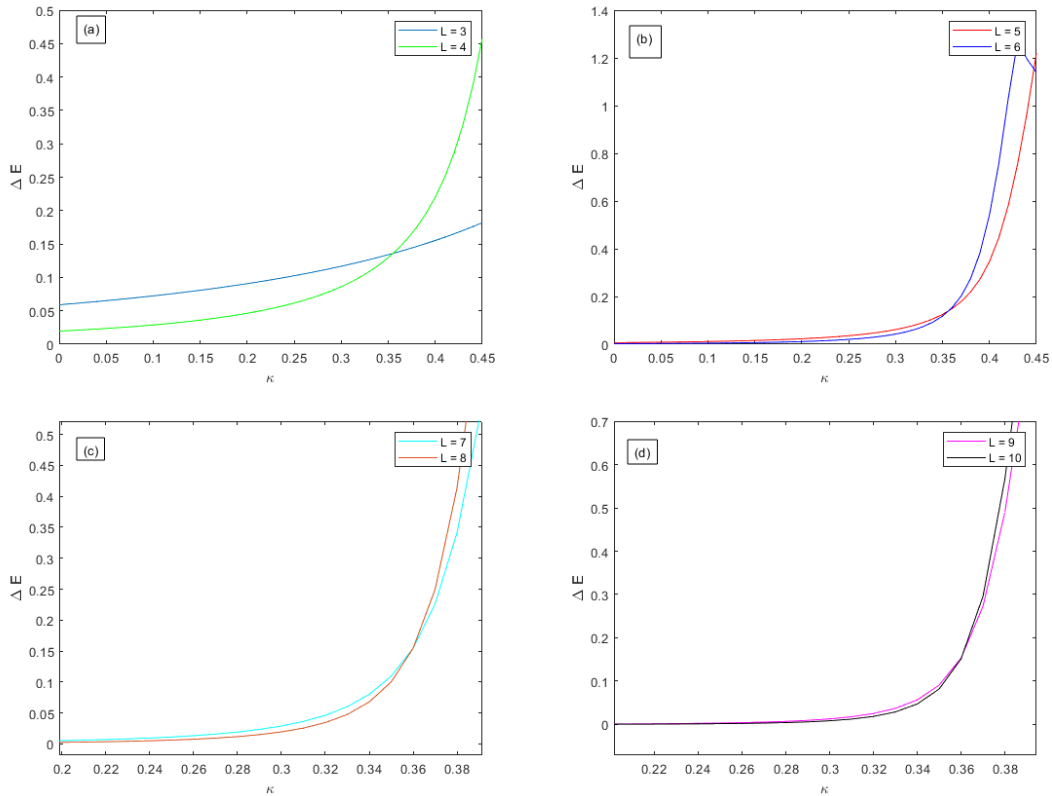


Figura 4 – Gráficos do Finite-Size-Scaling ($\Delta E \cdot L$) pelo parâmetro de interação entre segundos vizinhos (κ), com parâmetro do campo (g) fixado em 0,3; (a) para 3 e 4 sítios (azul - $L = 3$, verde - $L = 4$); (b) para 5 e 6 sítios (vermelho - $L = 5$, azul - $L = 6$); (c) para 7 e 8 sítios (ciano - $L = 7$, laranja - $L = 8$); (d) para 9 e 10 sítios (rosa - $L = 9$, preto - $L = 10$).

Os valores obtidos para os cruzamentos com $g = 0,3$ foram dispostos na tabela a seguir, Tabela 1.

Tamanho da cadeia (L)	Ponto crítico (κ)
4	0,354885(0)
5	0,354233(5)
6	0,356325(5)
7	0,358266(4)
8	0,359911(5)
9	0,360455(6)
10	0,360759(8)
.	
.	
.	
∞	0,3635 $\pm$ 0,005 (estimativa extrapolada)

Tabela 1. Valores estimados para o ponto crítico (κ) em função do tamanho da cadeia(L), com o parâmetro do campo fixado em 0,3 .

A Figura 4 mostra os cruzamentos da lacuna de energia ($\Delta E \cdot L$) pelo parâmetro de interação entre segundos vizinhos (κ), com o parâmetro do campo (g) fixado em 0,3. Pelo método FSS é possível determinar o ponto crítico onde ocorre a transição de fase, a partir da extrapolação calculada, utilizando bibliotecas do Python em conjunto com o software gráfico Origin, do ponto crítico (κ) em função do tamanho da cadeia (L), como mostra a Tabela 1.

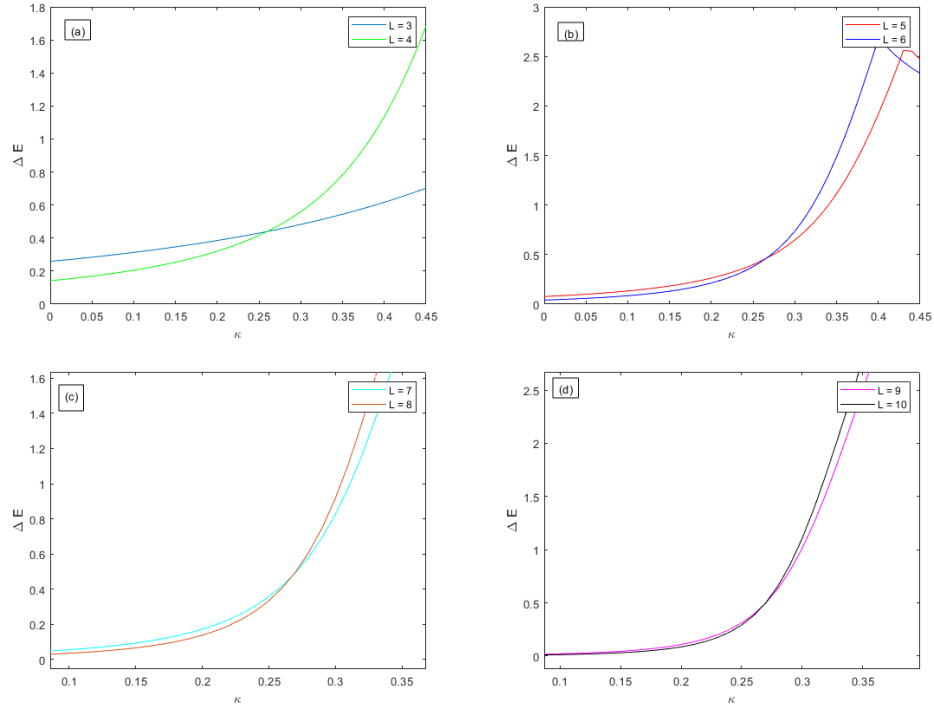


Figura 5 – Gráficos do Finite-Size $scaling(\Delta E \cdot L)$ pelo parâmetro de interação entre segundos vizinhos (κ), com parâmetro do campo(g) fixado em 0,5; (a) para 3 e 4 sítios (azul - $L = 3$, verde - $L = 4$); (b) para 5 e 6 sítios (vermelho - $L = 5$, azul - $L = 6$); (c) para 7 e 8 sítios (ciano - $L = 7$, laranja - $L = 8$); (d) para 9 e 10 sítios (rosa - $L = 9$, preto - $L = 10$) .

Os valores obtidos para os cruzamentos com $g = 0,5$ foram dispostos na Tabela 2.

Tamanho da cadeia (L)	Ponto crítico (κ)
4	0,259486(1)
5	0,262358(0)
6	0,265307(5)
7	0,266853(0)
8	0,268090(6)
9	0,268660(9)
10	0,268998(5)
.	
.	
.	
∞	0,27203 $\pm$ 0,005 (estimativa extrapolada)

Tabela 2. Valores estimados para o ponto crítico (κ) em função do tamanho da cadeia(L), com o parâmetro do campo (g) fixado em 0,5 .

A Figura 5 mostra os cruzamentos da lacuna de energia (ΔE) pelo parâmetro de interação entre segundos vizinhos (κ), com o parâmetro do campo (g) fixado em 0,5. Pelo método FSS é possível determinar o ponto crítico onde ocorre a transição de fase, a partir da extrapolação do ponto crítico (κ) em função do tamanho da cadeia (L), como mostra a Tabela 2.

Com base nos valores de pontos críticos obtidos, através do método de escala de tamanho finito, foi possível mapear a transição de fase presente na Figura 6.

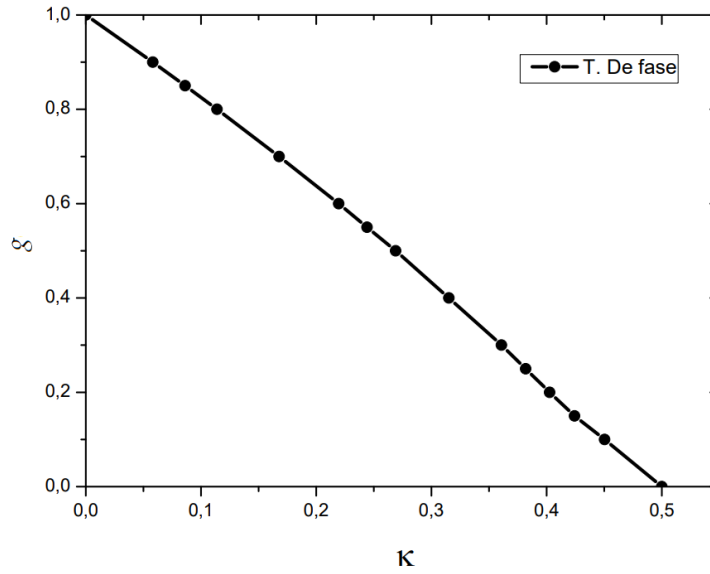


Figura 6 – Linha de transição de fase estimada para valores de $\kappa < 0,5$.

A Figura 6 mostra a linha de transição de fase que ocorre ao variar o parâmetro de interação de segundos vizinhos (κ) em função do parâmetro de interação com o campo (g). Abaixo da linha de transição está presente a fase ferromagnética, que foi caracterizada utilizando as funções de correlação de spin no espaço real, e os fatores de estrutura magnéticos. Mais detalhes são discutidos adiante.

A seguir, apresentamos os resultados obtidos para valores de $\kappa > 0,5$. O método descrito acima é capaz de estimar apenas transições de segunda ordem. Transições entre a fase flutuante é difícil de obter dentro do presente esquema, principalmente porque só podemos usar sistemas finitos, o que restringe o número possível de estados com diferentes modulações nessa fase. No entanto, uma estimativa de tamanho finito para transições de primeira ordem pode ser obtida calculando os pontos, para um dado tamanho de cadeia L .

Foi construído e diagonalizado um hamiltoniano para uma cadeia com oito sítios ($L = 8$), podendo assim obter os valores do espectro de energia. Diferente do método citado anteriormente, a lacuna de energia é dada pela diferença do segundo estado excitado pelo estado fundamental: $\Delta E_2 = E_2(\kappa, g) - E_0(\kappa, g)$.

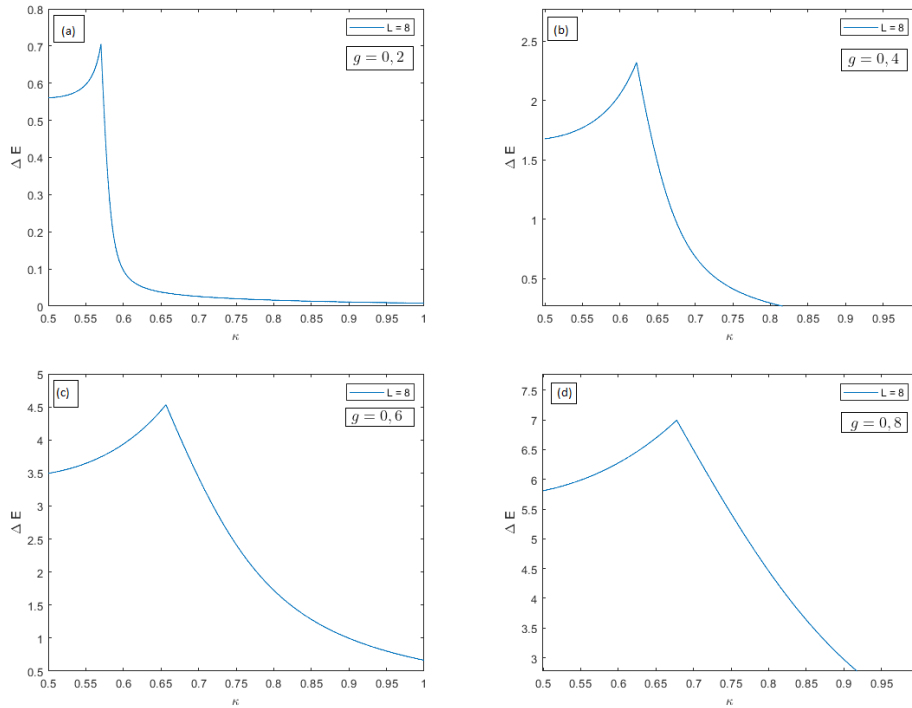


Figura 7 – Gráficos da lacuna de energia (ΔE_2) pelo parâmetro de interação entre segundos vizinhos (κ), com $L = 8$, para valores de $\kappa > 0,5$; (a) $g = 0,2$; (b) $g = 0,4$; (c) $g = 0,6$; (d) $g = 0,8$.

Fixando o parâmetro de interação com o campo (g) e variando o parâmetro de interação de segundos vizinhos (κ) em função da Lacuna de energia (ΔE), foi obtido os gráficos presentes na Figura 7. Através do cálculo de ponto máximo para cada gráfico construído, foi possível estimar os valores de pontos críticos da linha de transição de fase, como mostra a Figura 8.

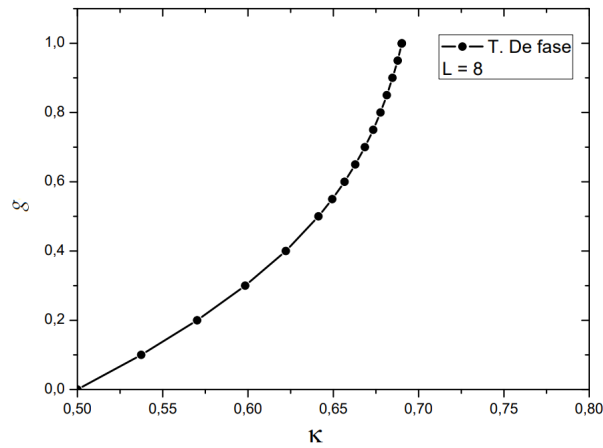


Figura 8 – Linha de transição de fase estimada para valores de $\kappa > 0,5$.

A Figura 8 mostra a linha de transição de fase estimada para valores de $\kappa > 0,5$, que ocorre ao variar o parâmetro de interação de segundos vizinhos (κ) em função do parâmetro de interação com o campo (g).

Com as transições de fase determinadas, é necessário caracterizar cada uma das fases presentes no modelo da Eq. (3.1), utilizando as funções de correlação do spin no espaço real Eq. (4.3) e seus correspondentes fatores de estrutura magnéticos, Eqs. (4.4) e (4.5).

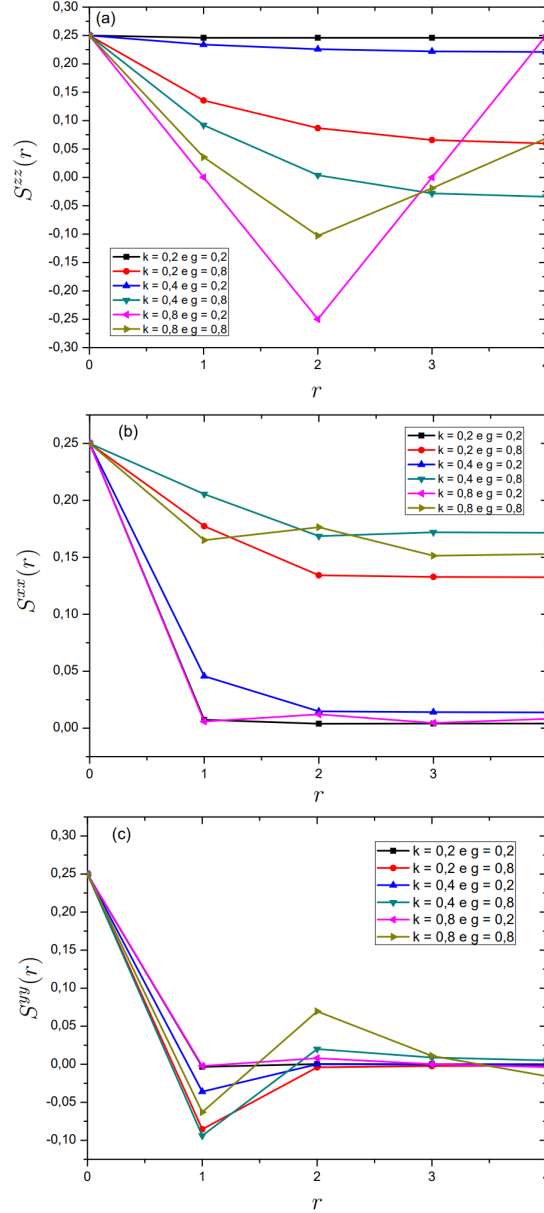


Figura 9 – Resultados obtidos para 8 sítios, para diferentes valores de κ e g : (a) dependência espacial da função de correlação- zz dos momentos magnéticos localizados; (b) dependência espacial da função de correlação- xx ; (c) dependência espacial da função de correlação- yy . Todos obtidos da Eq. (4.3).

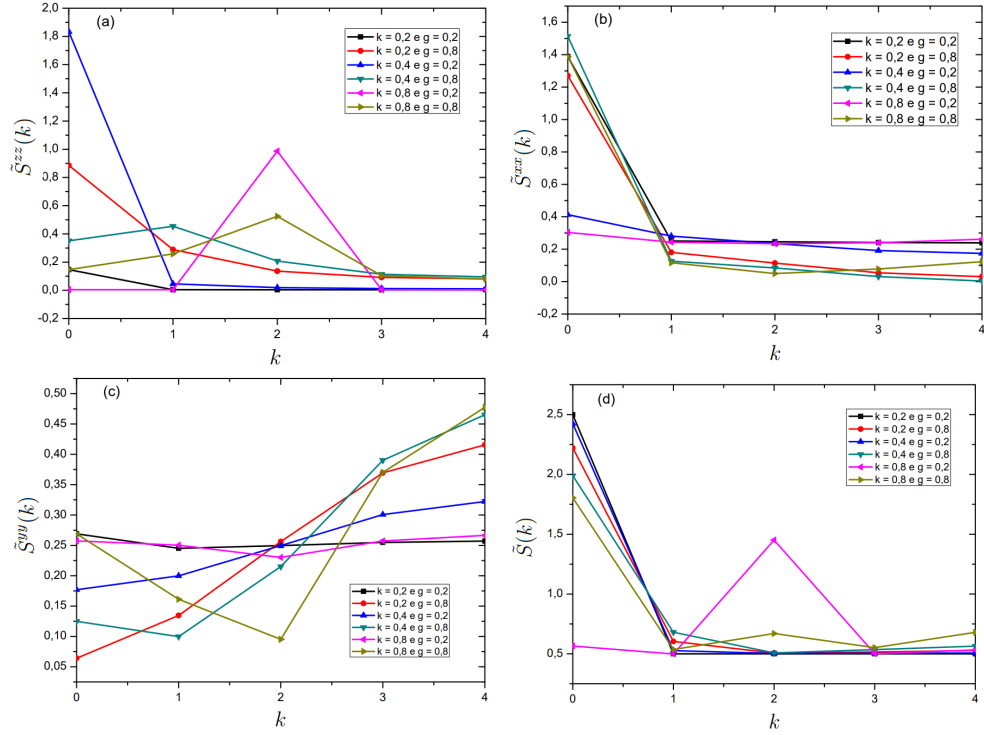


Figura 10 – Resultados obtidos para 8 sítios, para diferentes valores de κ e g : (a) fator de estrutura magnética $\tilde{S}_{zz}(k)$ em função do número de onda k (em unidades de $(2\pi/L)$); (b) fator de estrutura magnética $\tilde{S}_{xx}(k)$ em função do número de onda k ; (c) fator de estrutura magnética $\tilde{S}_{yy}(k)$ em função do número de onda k ; (d) soma dos fatores de estrutura magnéticos $\tilde{S}(k)$ em função do número de onda k .

Fase	Segundos vizinhos (k)	Campo (g)
Ferromagnética	0, 2	0, 2
Paramagnética	0, 2	0, 8
Ferromagnética	0, 4	0, 2
Paramagnética	0, 4	0, 8
Antifase	0, 8	0, 2
Antifase	0, 8	0, 8

Tabela 3. Fases que o sistema pode assumir para determinados valores do parâmetro de interação de segundos vizinhos (k) e parâmetro de interação com o campo magnético transversal (g).

A Figura 9 mostra os gráficos da dependência espacial da função de correlação (x, y, z) , enquanto a Figura 10 mostra os gráficos dos fatores de estrutura magnéticos (x, y, z) (Equações (4.4)) em função do número de onda k (em unidades de $(2\pi/L)$). Os resultados foram obtidos, analisando uma cadeia com 8 sítios. É possível notar que para diferentes valores de k e g as funções de correlação e os fatores de estrutura magnéticos caracterizam de forma perceptível cada fase do modelo.

Com base nos resultados obtidos para localizar as transições e caracterizar cada fase presente no modelo Equação (3.1), foi possível determinar o diagrama de fases presente na Figura 11.

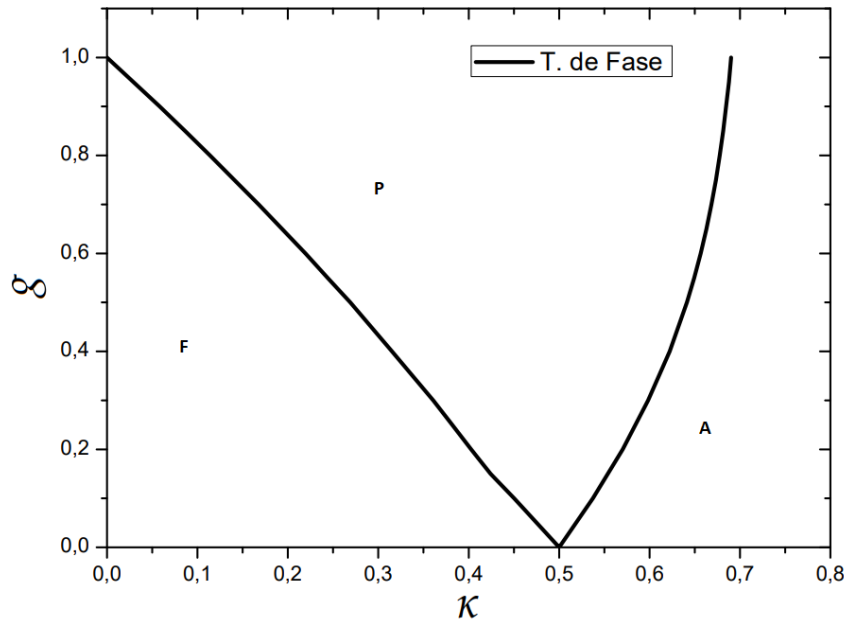


Figura 11 – Diagrama de fases global obtido a partir da presente abordagem. (P) representa a fase paramagnética, (F) fase ferromagnética e (A) antifase.

A Figura 11 combina as Figuras 6 e 8 e mostra o diagrama de fases global obtido a partir da abordagem realizada neste trabalho. Se compararmos com o diagrama de fase Figura 3, vemos que nossos resultados são consistentes com as transições de fase conhecidas para o ANNNI.

6 Conclusão

A diagonalização numérica de sistemas finitos em conjunto com o método FSS permite obtermos o diagrama de fases quânticas de modelos de elétrons fortemente correlacionados. A abordagem realizada neste trabalho para sistemas de escala de tamanho finito, com cadeias unidimensionais, e aplicando condições de contorno periódicas, é capaz de fornecer resultados muito bons para a linha de transição de fase de segunda ordem ferromagnética-paramagnética do modelo ANNNI. Em relação à fase flutuante, uma localização aproximada de uma transição de primeira ordem pode ser alcançada utilizando os métodos apresentados neste trabalho. Esta região é de fato bastante complexa e merece um estudo mais detalhado de sua estrutura interna. O modelo e os métodos utilizados para localizar e caracterizar cada fase são certamente aplicáveis a dimensões maiores, preservando a maioria das características qualitativas já discutidas neste manuscrito.

Referências

- [1] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 1971.
- [2] S. R. de Almeida, *Transições de fases quânticas em sistemas de spins em redes de baixa dimensionalidade*. 2015. Tese (Doutorado)- Curso de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Minas Gerais, 2015.
- [3] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism (Graduate Texts in Contemporary Physics)*. Springer-Verlag, 1994.
- [4] H. T. Diep, *Frustrated Spin systems*. World Scientific, 2004.
- [5] S. Sachdev, *Quantum phase transitions*. Cambridge, Univ. Press, New Yourk, 1999.
- [6] E. Dagotto, *Correlated electrons in high-temperature superconductors*. Rev. Mod. Phys., vol. 66, p. 763, 1994.
- [7] R. Elliott, *Phenomenological discussion of magnetic ordering in the heavy rare-earth metals*. Phys. Rev. 124, 346–353, 1961.
- [8] W. Selke, *The ANNNI model—theoretical analysis and experimental application*. Phys. Rep. 170(4), 213–264, 1988.
- [9] J. Yeomans, *The theory and application of axial Ising models. Solid State*. Phys. 41, 151–200, 1988.
- [10] B. K. Chakrabarti, A. Dutta, and P. Sen, *Quantum Ising Phases and Transitions in Transvers Ising Models*. Springer, 1996.
- [11] M. Fisher and M. N. Barber, “Scaling theory for finite-size effects in the critical region,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 28, p. 1516, 1972.
- [12] C. J. Hamer and M. N. Barber, “Finite-lattice methods in quantum hamiltonian field theory. I. The Ising model,” *J. Phys. A: Math*, vol. 14, no. 241, 1981.
- [13] M. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems: An Approach to Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2017.
- [14] W. F. Wreszinski, *Termodinâmica*. Edusp, 2018.
- [15] E. Ising, “Beitrag zur theorie des ferromagnetismus,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 31, no. 1, pp. 253–258, 1925.

- [16] W. Heisenberg, “Zur theorie des ferromagnetismus,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 49, pp. 619–636, 1928.
- [17] J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands,” *Proceedings of the Royal Society of London*, vol. 276, no. 1365, pp. 238–257, 1963.
- [18] S. F. Edwards and P. W. Anderson, “Theory of spin glasses,” *J. Phys. F: Metal Phys.*, vol. 5, no. 5, p. 965, 1975.
- [19] A. L. Malvezzi, “An introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems,” *Braz. J. Phys.*, vol. 33, p. 55, 2003.
- [20] N. S. Yanofsky and M. A. Mannucci, *Quantum Computing for Computer Scientist*. Cambridge University Press, 2008.
- [21] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension*. Clarendon Press, 2003.
- [22] P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids - Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer-Verlag, 2012.
- [23] J. Bonca, P. Prelovsek, A. Ramsak, and S. Sarkar, *Open Problems in Strongly Correlated Electron Systems*. Springer Netherlands, 2001.