



**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
“JÚLIO DE MESQUITA FILHO”**

Lucas Alexandre Marques Rattighieri

**ESTUDO ANALÍTICO E NUMÉRICO DO MODELO DE
ISING QUÂNTICO ANISOTRÓPICO COM INTERAÇÕES DE
SEGUNDOS VIZINHOS EM UMA DIMENSÃO: SIMETRIAS
E FASES QUÂNTICAS**

Bauru

2023

Lucas Alexandre Marques Rattighieri

**ESTUDO ANALÍTICO E NUMÉRICO DO MODELO DE
ISING QUÂNTICO ANISOTRÓPICO COM INTERAÇÕES DE
SEGUNDOS VIZINHOS EM UMA DIMENSÃO: SIMETRIAS
E FASES QUÂNTICAS**

Trabalho de conclusão de curso apresentado
à banca do Departamento de Física da Facul-
dade de Ciências com propósito de obter o
Título de Graduação Bacharelado em Física
de Materiais pela Universidade Estadual Pau-
lista "Júlio De Mesquita Filho".

Orientador: André Luiz Malvezzi

**Bauru
2023**

R237e

Rattighieri, Lucas Alexandre Marques

Estudo analítico e numérico do modelo de Ising quântico anisotrópico com interações de segundos vizinhos em uma dimensão: simetrias e fases quânticas / Lucas Alexandre Marques Rattighieri. -- Bauru, 2023
40 f. : il., tabs.

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

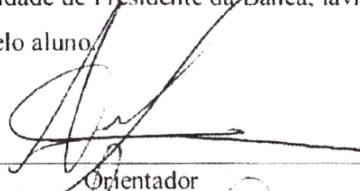
1. Física. 2. Transformações de fase. 3. Ising, Modelo de. I. Título.

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

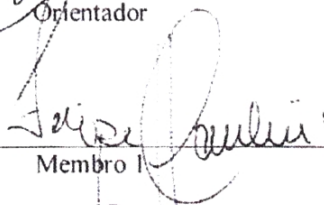
Essa ficha não pode ser modificada.

ATA DE DEFESA PÚBLICA DO TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

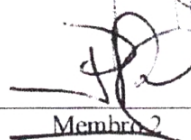
Aos 16 dias do mês de Fevereiro de 2023, às 14:00 hs, em sessão pública em formato virtual via Google Meet, na presença da Banca Examinadora presidida pelo **Prof. André Luiz Malvezzi** e composta pelos examinadores **Prof. Felipe Fernandes Fanchini** e **Prof. Pablo Antonio Venegas Urenda**, o aluno **Lucas Alexandre Marques Rattighieri** apresentou o trabalho de conclusão de curso intitulado: “**Estudo analítico e numérico do Modelo de Ising quântico anisotrópico com interações de segundos vizinhos em uma dimensão: simetrias e fases quânticas**”, 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.



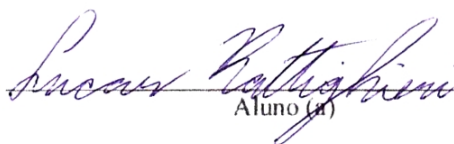
Orientador



Membro I



Membro 2



Aluno (a)

Agradecimentos

Primeiramente, agradeço a Deus por sua graça e misericórdia e por ter me acompanhado em cada passo dessa jornada. Seu amor e bondade foram essenciais para que eu pudesse chegar até aqui.

Em seguida, a minha família, em especial, aos meus pais, Rubens e Daniela, por sua dedicação e amor. Por acreditarem em mim, me guiarem e me apoiarem, eu sou imensamente grato.

Aos meus professores, agradeço por compartilharem seus conhecimentos e sabedorias, tornando-me uma pessoa mais esclarecida e preparada para o futuro. Em especial, agradeço ao professor André Luiz Malvezzi, que me orientou com sabedoria, paciência e dedicação durante a construção deste trabalho.

Por fim, agradeço aos meus amigos, por terem compartilhado essa jornada de graduação comigo, enfrentando e vencendo juntos as dificuldades. Em especial, gostaria de agradecer à Jessica e ao Lucas Lima pela amizade e apoio durante a graduação; vocês serão sempre lembrados com carinho.

*“Se o meu povo, que se chama pelo meu nome,
se humilhar e orar, buscar a minha face e se afastar
dos seus maus caminhos, dos céus o ouvirei,
perdoarei o seu pecado e curarei a sua terra.”
(Bíblia Sagrada, 2 Crônicas 7, 14)*

Resumo

Através de modelos de elétrons fortemente interagentes em uma rede, tais como o modelo de Heisengberg, Hubbard e Ising, é possível descrever uma série de fenômenos na fronteira da física, como a supercondutividade de alta temperatura crítica e férmions pesados. Além disso, através deles é possível compreender as transições de fases quânticas.

Neste sentido, este trabalho busca estudar as propriedades do Modelo de Ising Quântico Anisotrópico com Interações de Segundos Vizinhos (ANNNI), numa cadeia linear. A abordagem teórica da análise de simetrias e o método numérico de Lanczos serão utilizados para diagonalizar a matriz Hamiltoniana. Dessa forma, será possível entender algumas das propriedades físicas do estado fundamental e identificar as principais fases presentes no modelo: ferromagnética, paramagnética e antifase.

Palavras-chave: Modelo ANNNI, Simetrias do Modelo ANNNI, Método de Lanczos, Transições de Fases Quânticas.

ABSTRACT

Through models of strongly interacting electrons in a lattice, such as the model of Heisengberg, Hubbard and Ising, it is possible to describe a series of phenomena at the frontier of physics, such as superconductivity of high critical temperature and heavy fermions. Furthermore, through them it is possible to understand the transitions of quantum phases.

In this sense, this work seeks to study the properties of the Anisotropic Next Nearest Neighbour Ising (ANNNI), in a linear chain. The theoretical approach of symmetry analysis and the numerical method of Lanczos will be used to diagonalize the Hamiltonian matrix. In this way, it will be possible to understand some of the physical properties of the ground state and identify the main phases present in the model: ferromagnetic, paramagnetic and antiphase.

Keywords: ANNNI Model, ANNNI Model Symmetries, Lanczos Method, Quantum Phase Transitions.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Modelo ANNNI em uma cadeia. Adaptada da Referência [1].	15
Figura 2 – Diagrama de fase esquemático do modelo ANNNI transversal. Adaptada da Referência [2].	16
Figura 3 – Hamiltoniana de Ising representada na base padrão $\{ s\rangle\}$	24
Figura 4 – Hamiltoniana de Ising representada na base $\{ j, z\rangle\}$. O bloco superior esquerdo (destacado em azul escuro), está associado ao autovalor -1 e o bloco inferior direito (destacado em azul claro) ao autovalor +1.	25
Figura 5 – Hamiltoniana de Ising representada na base $\{ j, w, t, z\rangle\}$	26
Figura 6 – Decomposição do bloco 5×5	27
Figura 7 – Distribuição de Probabilidade dos estados em função do parâmetro de interação dos segundos vizinhos κ para (a) $g = 0, 1$, (b) $g = 0, 3$, (c) $g = 0, 7$ e (d) $g = 1, 0$	29
Figura 8 – Resultados obtidos para 4 sítios, para diferentes combinações 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. (6.1).	32
Figura 9 – Resultados obtidos para 8 sítios, para diferentes combinações 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. (6.1).	33
Figura 10 – Resultados obtidos para 16 sítios, para diferentes combinações 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. (6.1).	34
Figura 11 – Resultados obtidos para 4 sítios, para diferentes combinações de κ e g : (a) do fator de estrutura $\tilde{S}^{zz}(k)$ em função do número de onda k ; (b) do fator de estrutura $\tilde{S}^{xx}(k)$ em função do número de onda k ; (c) do fator de estrutura $\tilde{S}^{yy}(k)$ em função do número de onda k ; (d) soma dos fatores de estrutura $\tilde{S}(k)$ em função do número de onda k	35

Figura 12 – Resultados obtidos para 8 sítios, para diferentes combinações de κ e g :
 (a) do fator de estrutura $\tilde{S}^{zz}(k)$ em função do número de onda k ; (b)
 do fator de estrutura $\tilde{S}^{xx}(k)$ em função do número de onda k ; (c) do
 fator de estrutura $\tilde{S}^{yy}(k)$ em função do número de onda k ; (d) soma
 dos fatores de estrutura $\tilde{S}(k)$ em função do número de onda k 36

Figura 13 – Resultados obtidos para 16 sítios, para diferentes combinações de κ e g :
 (a) do fator de estrutura $\tilde{S}^{zz}(k)$ em função do número de onda k ; (b)
 do fator de estrutura $\tilde{S}^{xx}(k)$ em função do número de onda k ; (c) do
 fator de estrutura $\tilde{S}^{yy}(k)$ em função do número de onda k ; (d) soma
 dos fatores de estrutura $\tilde{S}(k)$ em função do número de onda k 37

Lista de tabelas

Tabela 1 – Valores da energia do estado fundamental (E_0) (convergidos até o último dígito apresentado), obtidos através do método do Lanczos, para determinados valores do parâmetro de interação de segundos vizinhos (κ) e parâmetro de interação com o campo magnético transversal (g), para uma cadeia de 16 sítios.	30
Tabela 2 – Fases que o sistema pode assumir para determinados valores do parâmetro de interação de segundos vizinhos (κ) e parâmetro de interação com o campo magnético transversal (g).	30

Sumário

1	OBJETIVOS	12
2	INTRODUÇÃO	13
3	MODELO ANNNI EM UM CAMPO TRANSVERSO	14
3.1	Interações entre Spins	14
3.2	Modelo ANNNI	14
3.3	Campo Transverso	15
4	SIMETRIAS DO MODELO ANNNI TRANSVERSO	17
4.1	Representação Matricial	17
4.2	Simetrias	18
4.2.1	Inversão	18
4.2.2	Reflexão	18
4.2.3	Translação	19
5	MÉTODO DE LANCZOS	20
6	METODOLOGIA	22
7	RESULTADOS E DISCUSSÃO	24
7.1	Diagonalização da cadeia de 4 sítios	24
7.2	Inspeção da função de onda	28
7.3	Iterações do método de Lanczos	29
7.4	Valores médios dos Observáveis	30
8	CONCLUSÃO	38
	REFERÊNCIAS	39

1 OBJETIVOS

Neste trabalho, faremos uma análise do modelo de Ising quântico anisotrópico com interações de segundos vizinhos (ANNNI) em uma cadeia linear. Nosso objetivo é resolver a equação de Schrödinger por meio de duas abordagens distintas: analisando as simetrias do modelo de forma teórica e utilizando o método de Lanczos de forma numérica. Além disso, também pretendemos identificar as principais fases ou ordens presentes no estado fundamental, incluindo a ferromagnética, a paramagnética e a antifase.

2 INTRODUÇÃO

Uma transição de fase é uma mudança de um estado físico de um sistema para outro, geralmente relacionada às alterações nas simetrias internas dos componentes do sistema [3]. Essas transições ocorrem devido a variações em parâmetros intensivos, como temperatura, pressão, entre outros, e estão relacionadas à mudança entre estados de ordem e desordem no sistema. Como exemplo, pode ser citado a mudança de estado da água de sólido para líquido ou de líquido para gasoso a medida que a temperatura aumenta.

A medida que a temperatura diminui, no limite em que $T = 0$, as transições de fase quânticas passam a ocorrer. Tais transições estão relacionadas a mudanças abruptas na estrutura do estado fundamental, causadas devido a variação de um parâmetro da Hamiltoniana do sistema [4], como pressão ou campo magnético, conhecido como parâmetro de controle. O interesse por estudar este assunto acabou se intensificando nas últimas décadas, devido à presença de muitos sistemas que apresentam essas mudanças de estado e à sua aplicação em uma ampla gama de problemas, incluindo a construção de teorias de campo e de cordas de partículas elementares [5].

Do ponto de vista teórico, as transições de fase quânticas podem ser estudadas em sistemas de elétrons fortemente interagentes em redes, que apresentam diagramas de fase complexos. Modelos paradigmáticos incluem o modelo de Ising [6], Heisenberg [7] e Hubbard [8]. Esses modelos e suas generalizações descrevem uma ampla gama de fenômenos na fronteira da física da matéria condensada, tais como supercondutividade de alta temperatura crítica, férmions pesados e outros sistemas de elétrons fortemente correlacionados [9, 10].

Entre esses modelos, o Modelo de Ising é especialmente notável, sendo apreciado pela sua simplicidade, que permite uma fácil compreensão dos conceitos físicos subjacentes. Ele foi nomeado em homenagem ao físico alemão Ernst Ising [11], que estudou o caso clássico de uma cadeia unidimensional de spins em seu doutorado, a partir de uma sugestão de seu orientador, o professor W. Lenz. Em 1925, Ising publicou um artigo resumindo sua tese, chegando à conclusão de que nenhuma transição de fase para um estado ferromagnético ocorre a qualquer temperatura. Embora essa conclusão tenha sido posteriormente mostrada como incorreta.

Sendo assim, neste trabalho será estudado uma generalização do modelo de Ising, o Modelo de Ising Quântico Anisotrópico com interações de Segundos Vizinhos [12] (Anisotropic Axial Next Nearest Neighbour Ising, ANNNI, do inglês). Seu diagrama de fases quânticas é enriquecido pela competição entre os termos de primeiros e segundos vizinhos, mantendo-se a tendência de desordem introduzida pelo campo transversal.

3 MODELO ANNNI EM UM CAMPO TRANSVERSO

3.1 Interações entre Spins

Primeiro, vamos considerar um modelo genérico de rede formado por uma cadeia unidimensional de L sítios. Os sítios são indexados de 0 a $L - 1$. Cada sítio i é ocupado por um spin meio S_i que pertence a um espaço de estado, $\mathcal{E}_i$, de dimensão 2. A base do espaço de estado são os autoestados de S^z $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

As interações entre spins de sítios diferentes se dão por meio de pares de acoplamento $-J_{ij}S_i^z S_j^z$, onde J_{ij} são integrais de troca [1]. O ordenamento dos spins é dado pela forma das interações. Para o caso em que $J_{ij} > 0$ os spins preferem apontar para mesma direção, enquanto que para o caso em que $J_{ij} < 0$ os spins preferem apontar em direções opostas.

Agora, vamos considerar o caso em que as interações ocorrem apenas entre os primeiros vizinhos. Se $J_{ij} > 0$ todos os spins tenderão a apontar para mesma direção, formando a fase ferromagnética ($\cdots + + + + + \cdots$ ou $\cdots - - - - - \cdots$). Se $J_{ij} < 0$, os spins vizinhos tenderão a apontar em direções opostas, formando a fase antiferromagnética ($\cdots + - + - + - \cdots$).

Os dois casos acima são de interações diferentes que levam a estados ordenados diferentes. É possível que dois tipos de interações conflitantes atuem sobre os spins, onde o tipo de interações dominante definirá a ordem do sistema. Porém, se as duas interações forem de magnitudes compatíveis, uma nova solução de "compromisso" entre os spins pode surgir [1], dando origem a um novo tipo de fase, um novo tipo de ordem.

3.2 Modelo ANNNI

Um dos modelos mais simples que ilustra essa situação é o Modelo de Ising Quântico Anisotrópico com Interações de Segundos Vizinhos (ANNNI). Nesse modelo, as interações entre os spins não ocorrem em todas as direções, mas são restritas a spins alinhados na direção z , o que o torna anisotrópico. O modelo apresenta interações ferromagnéticas entre os primeiros vizinhos, $J_1 = J > 0$, e interações antiferromagnéticas entre os segundos vizinhos, $J_2 < 0$ (Fig. 1). A Hamiltoniana do modelo pode ser escrita como:

$$H = -J \left(\sum_{i=0}^{L-1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \kappa \sum_{i=0}^{L-1} \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z \right). \quad (3.1)$$

Sendo σ_j^a , com $a = x, y, z$, as matrizes de Pauli dadas por

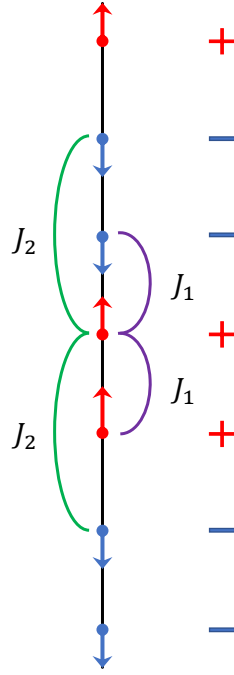


Figura 1 – Modelo ANNNI em uma cadeia. Adaptada da Referência [1].

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

que atuam no sítio i da cadeia com L sítios. $\kappa = -J_2/J > 0$ é uma constante de acoplamento adimensional, que descreve a intensidade das interações de segundos vizinhos.

Para $\kappa < 1/2$, as interações entre primeiros vizinhos serão dominantes, levando a ordem ferromagnética. Para $\kappa > 1/2$, as interações entre segundos vizinhos serão dominantes, levando à formação da antifase ($\cdots ++--++-- \cdots$), tendo um ordenamento ferromagnético entre os primeiros vizinhos, e um ordenamento antiferromagnético entre os segundos vizinhos.

3.3 Campo Transverso

Podemos introduzir uma tendência de desordem ao acrescentar um termo à Hamiltoniana de ANNNI que descreva a atuação de um campo transverso sobre a cadeia. Dessa forma, temos que a Hamiltoniana de ANNNI em um campo transverso é dada por [12]:

$$H = -J \sum_{i=0}^{L-1} (\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \kappa \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z + g \sigma_i^x). \quad (3.3)$$

onde $g = -B/J > 0$ (sendo B o campo magnético externo) é uma constante de acoplamento adimensional, que descreve a intensidade do campo transverso, o qual aponta para a direção x . Assim, a fase paramagnética é acrescentada ao modelo. Esta é uma fase desordenada,

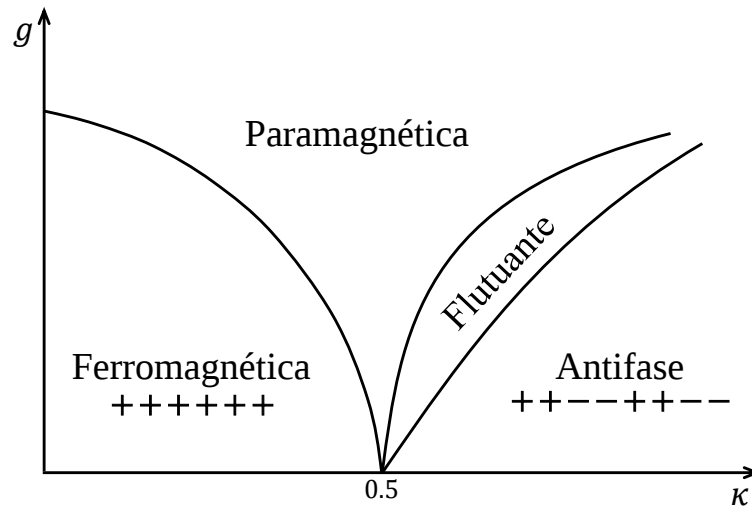


Figura 2 – Diagrama de fase esquemático do modelo ANNNI transversal. Adaptada da Referência [2].

que possui um estado fundamental que pode ser representado pelos spins apontando na direção do campo [13].

Neste trabalho analisaremos o modelo ANNNI descrito pela Eq. (3.3), em que condições periódicas de contorno são aplicadas, ou seja, $\sigma_L^a = \sigma_0^a$. A constante de acoplamento $J(>0)$ da interação ferromagnética do primeiro vizinho define a escala de energia (usamos $J = 1$).

O diagrama de fases do estado fundamental do modelo ANNNI exibe quatro fases: ferromagnética, antifase, paramagnética e flutuante incommensurável (que ainda não é muito bem compreendida), separadas por três transições de fase quânticas (Fig. 2).

4 SIMETRIAS DO MODELO ANNNI TRANSVERSO

4.1 Representação Matricial

Como já foi mencionado anteriormente, o espaço de estados de cada sítio i , denotado por $\mathcal{E}_i$, de spin, tem dimensão dois. Consequentemente, o espaço de estado da cadeia de Ising, $\mathcal{E}$, pode ser representado pelo produto tensorial dos espaços de estado dos sítios que o compõem:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 \otimes \mathcal{E}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{E}_{L-1} \quad (4.1)$$

Deste modo, a Hamiltoniana (Eq. (3.3)) atua sobre um espaço de Hilbert de dimensão 2^L . Assim, a representação matricial de H tem ordem 2^L , o que torna a diagonalização extremamente desafiadora para cadeias com um grande número de sítios.

Uma maneira de simplificar o processo é aproveitar as simetrias do modelo ANNNI, as quais são expressas por operadores que comutam com a Hamiltoniana. Se esses operadores também comutarem entre si, é possível construir uma base de autovetores comuns a eles [14]:

Teorema 1. *Se dois ou mais Observáveis comutam, pode-se construir uma base ortonormal do espaço de estado com auto-vetores comuns a eles.*

Dessa forma, representando a Hamiltoniana nessa base, ela apresentaria a forma bloco-diagonal:

$$\left(\begin{array}{c|c|c|c} \begin{array}{cc} \ddots & \ddots \\ \ddots & \ddots \end{array} & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \begin{array}{ccc} \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots \\ \ddots & \ddots & \ddots \end{array} & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \ddots & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \begin{array}{cc} \ddots & \ddots \\ \ddots & \ddots \end{array} \end{array} \right) \quad (4.2)$$

tornando possível diagonalizar cada bloco individualmente, o que facilita o processo de diagonalização.

4.2 Simetrias

As simetrias que serão analisadas são as de Inversão, Reflexão e Translação. Os operadores que os representam atuam sobre a cadeia sem alterar as interações entre os spins, o que resulta em sua comutação com a Hamiltoniana.

4.2.1 Inversão

A simetria de Inversão, representada pelo operador I (também é denotada como simetria $\mathbb{Z}_2$ [5, 13]), ao atuar em um estado inverte os spins dos sítios:

$$|++-+-+\rangle \rightarrow |--+-++\rangle$$

Ao atuar duas vezes o operador I em um dado estado:

$$|d_0 d_1 d_2 \cdots d_{L-1}\rangle = |d_0\rangle \otimes |d_1\rangle \otimes |d_2\rangle \otimes \cdots |d_{L-1}\rangle \quad (4.3)$$

onde d_i é o estado do sítio i , obtemos o próprio estado inicial:

$$I^2 |d_0 d_1 d_2 \cdots d_{L-1}\rangle = |d_0 d_1 d_2 \cdots d_{L-1}\rangle \quad (4.4)$$

Deste modo, I tem como autovalores $z = \pm 1$, com respectivos autovetores:

$$|j, z\rangle = c[1 + zI] |d_0 d_1 d_2 \cdots d_{L-1}\rangle \quad (4.5)$$

onde c é uma constante de normalização e j um índice de degenerescência.

4.2.2 Reflexão

A operação de reflexão é representada pelo operador W [15] e tem a capacidade de inverter a posição dos spins em relação ao ponto central de reflexão em uma cadeia:

$$W |d_0 d_1 \cdots d_{L-2} d_{L-1}\rangle = |d_{L-1} d_{L-2} \cdots d_1 d_0\rangle \quad (4.6)$$

Da mesma forma que I , ao aplicar duas vezes W em um estado, ele gera o próprio estado:

$$W^2 |d_0 d_1 d_2 \cdots d_{L-1}\rangle = |d_0 d_1 d_2 \cdots d_{L-1}\rangle \quad (4.7)$$

Assim, seus autovalores são $w = \pm 1$ com respectivos autovetores:

$$|j, w\rangle = c[1 + wW] |d_0 d_1 d_2 \cdots d_{L-1}\rangle \quad (4.8)$$

4.2.3 Translação

A simetria de Translação é representada pelo operador T . Quando atua na cadeia, altera a posição dos sítios, fazendo com que estes sejam deslocados para as posições dos sítios vizinhos.:

$$T|d_0 d_1 \cdots d_{L-2} d_{L-1}\rangle = |d_1 d_2 \cdots d_{L-1} d_0\rangle \quad (4.9)$$

Os autovalores de T são dados por $e^{i\frac{2\pi}{L}\tau}$, $\tau = 0, 1, \dots, L-1$ [15]. Seus respectivos autoestados são:

$$|j, \tau\rangle = c[1 + U + U^2 + \cdots + U^{L-1}]|d_0 d_1 d_2 \cdots d_{L-1}\rangle \quad (4.10)$$

onde $U = e^{i\frac{2\pi}{L}\tau}T$. Se o resultado da expressão (4.10) for zero, o mesmo deve ser descartado como um dos vetores da base.

Poderíamos utilizar estes três operadores, T , I e W , para formar um conjunto de operadores que comutam. No entanto, isso não é possível já que o operador de reflexão não comuta com o operador de translação. Para solucionar esse problema, podemos utilizar uma das potências de T ao invés do próprio T . Em cadeias com um número par de sítios, podemos usar o operador $T^{L/2}$ como substituto, que possui autovalores $t = \pm 1$ com autovetores:

$$|j, t\rangle = c[1 + tT^{L/2}]|d_0 d_1 d_2 \cdots d_{L-1}\rangle \quad (4.11)$$

Dessa forma, é possível construir um conjunto de operadores que comutam usando $T^{L/2}$, I e W , tornando a Hamiltoniana uma representação bloco-diagonal na base formada por seus autovetores.

5 MÉTODO DE LANCZOS

Para cadeias com grandes quantidades de sítios, a diagonalização da Hamiltoniana pode ser um desafio, necessitando de métodos numéricos. O método de Lanczos é uma solução eficaz nesse cenário, sendo um método iterativo que aproxima os autovalores extremos de uma matriz hermitiana, permitindo encontrar o estado fundamental do sistema caso essa matriz seja a Hamiltoniana.

O método de Lanczos [15, 16] é uma abordagem baseada na construção de uma base, chamada de base de Lanczos, para representar a matriz Hamiltoniana H como uma matriz tridiagonal T de ordem α . O processo começa com a escolha de um vetor arbitrário $|\psi_0\rangle \in \mathcal{E}$ normalizado. Esse vetor é o primeiro elemento da base e é a partir dele que os demais vetores são gerados. Para obter o próximo vetor, $|\psi_1\rangle$, são aplicadas as equações:

$$|\phi_1\rangle = H|\psi_0\rangle - \langle\psi_0|H|\psi_0\rangle|\psi_0\rangle \quad (5.1)$$

$$|\psi_1\rangle = \frac{|\phi_1\rangle}{\sqrt{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}} \quad (5.2)$$

De maneira geral, os vetores da base são construídos de forma iterativa através das relações:

$$|\phi_\alpha\rangle = H|\psi_{\alpha-1}\rangle - a_{\alpha-1}|\psi_{\alpha-1}\rangle - b_{\alpha-1}|\psi_{\alpha-2}\rangle \quad (5.3)$$

$$|\psi_\alpha\rangle = \frac{|\phi_\alpha\rangle}{b_\alpha} \quad (5.4)$$

onde $\alpha = 0, 1, 2, \dots$, e os coeficientes a_α e b_α são dadas por:

$$a_\alpha = \langle\psi_\alpha|H|\psi_\alpha\rangle \quad \text{e} \quad b_\alpha = \sqrt{\langle\phi_\alpha|\phi_\alpha\rangle} \quad (5.5)$$

sendo $b_0 = 0$ e $|\phi_0\rangle = 0$. Esses coeficientes, por sua vez, são os termos que compõe a matriz T :

$$T = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & b_2 & a_3 & b_3 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & b_3 & a_4 & b_4 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & b_4 & a_5 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

A cada iteração é calculado o menor autovalor de T , o qual vai se aproximando cada vez mais da energia do estado fundamental à medida que α cresce. Esse processo é repetido até se obter uma precisão satisfatória, o que normalmente ocorre para um valor de α consideravelmente menor que a ordem da matriz H .

Após encontrar a energia do estado fundamental, é preciso calcular o seu autovetor correspondente, $|\Psi_0\rangle$, que representa o vetor do estado fundamental. Este autovetor está representado na base de Lanczos $\{|\psi_\alpha\rangle\}$, e para obtê-lo na base original é necessário realizar a seguinte operação:

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{\alpha} f_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \quad (5.7)$$

onde f_{α} são as componentes de $|\Psi_0\rangle$ na base de Lanczos.

No entanto, para isso, seria necessário armazenar os vetores gerados a cada iteração do método de Lanczos, o que pode demandar muita memória devido ao grande número de coeficientes de cada vetor. Uma alternativa é aplicar o método duas vezes: uma para encontrar a energia e os coeficientes f_{α} , e outra para realizar a soma descrita na Eq. (5.7).

6 METODOLOGIA

Para estudar o Modelo de ANNNI descrito pela Eq. (3.3), precisamos primeiramente resolver a Equação de Schrödinger independente do tempo. Do ponto de vista matemático, isso se resume a um problema de encontrar os autovalores e autovetores de H . No nosso caso, como estamos interessados em seu comportamento para o caso em que a temperatura é nula, precisamos obter apenas o autoestado que descreve o estado fundamental.

Neste sentido, vamos abordar este problema de duas maneiras diferentes. A primeira consiste em encontrar, de forma analítica, o estado fundamental para uma cadeia de Ising com 4 sítios. Para tal, vamos explorar as simetrias do modelo e representar a Hamiltoniana na base de autovetores comuns aos observáveis T^2 , W e I , obtendo assim uma forma bloco-diagonal que facilite o processo de diagonalização e destaque as simetrias de cada um de seus autoestados. Este método também será utilizado de forma numérica para uma cadeia de 8 sítios.

A segunda abordagem consiste em encontrar o estado fundamental de forma numérica, usando o método de Lanczos, desenvolvido com a linguagem de programação Python. Com esse método, encontramos o estado fundamental para cadeias de 16 sítios.

Uma vez determinada a função de onda que descreve o sistema em seu estado fundamental, estudaremos seu comportamento e propriedades em três fases do modelo ANNNI: ferromagnética, antifase e paramagnética. Isso será feito de duas formas:

- Pela inspeção direta na função de onda, para a cadeia de 4 sítios, observando-se suas componentes com maior probabilidade. Aqui, os Postulados da Mecânica Quântica pertinentes aos Observáveis e suas medidas serão aplicados.
- Pelo cálculo de valores médios de Observáveis tais como as correlações de spin no espaço real que são dadas por:

$$S^{\mu\mu}(r) = \langle S_i^\mu S_{i+r}^\mu \rangle, \quad \mu = x, y, z, \quad (6.1)$$

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

$$\tilde{S}^{\mu\mu}(k) = \frac{1}{L} \sum_{i,j=0}^{L-1} e^{ik(i-j)} \langle S_i^\mu S_j^\mu \rangle, \quad \mu = x, y, z, \quad (6.2)$$

assim como suas somas,

$$\tilde{S}(k) = \sum_{\mu=x,y,z} \tilde{S}^{\mu\mu}(k) , \quad (6.3)$$

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 spin¹ atuando no sítio i , 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.

¹ Onde adotamos $\hbar = 1$.

7 RESULTADOS E DISCUSSÃO

7.1 Diagonalização da cadeia de 4 sítios

Inicialmente, foi utilizada a base obtida através do produto tensorial da base dos sítios $\{|+\rangle, |-\rangle\}$, a qual foi denominada como base padrão $\{|s\rangle\}$. Essa base foi utilizada para representar a Hamiltoniana, como mostrado na Figura (3). Ela é composta pelos seguintes vetores:

$$\left\{ \begin{array}{l} |++++\rangle, |+++-\rangle, |++-+\rangle, |++--\rangle, \\ |+-++\rangle, |+-+-\rangle, |--++\rangle, |--+-\rangle, \\ |-+++\rangle, |-++-\rangle, |-+-+\rangle, |-+--\rangle, \\ |--++\rangle, |--+-\rangle, |-- -+\rangle, |-- --\rangle \end{array} \right\} \quad (7.1)$$

$$\begin{bmatrix} 4\kappa-4 & -g & -g & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -g & 0 & 0 & -g & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -g & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -g & -g & -4\kappa & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -g & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -g & 0 & 0 & -g & 4\kappa+4 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -g & 0 & -g & 0 & -4\kappa & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -g & 0 & -g & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g \\ -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & -g & 0 & -g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & -4\kappa & 0 & -g & 0 & -g & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 4\kappa+4 & -g & 0 & 0 & -g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & -g \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & -4\kappa & -g & -g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & -g \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & -g & 0 & 0 & -g \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & -g & -g & 4\kappa-4 \end{bmatrix}$$

Figura 3 – Hamiltoniana de Ising representada na base padrão $\{|s\rangle\}$.

A primeira operação aplicada foi a de Inversão de Spins. Para tanto, a base de seus autovetores foi construída a partir da aplicação da Eq. (4.5) aos vetores da base padrão, formando assim a base $\{|j, z\rangle\}$. A construção dessa nova base pode ser ilustrada ao aplicarmos a Eq. (4.5) ao vetor $|--+-\rangle \in \{|s\rangle\}$, considerando o caso em que $z = +1$. Dessa forma, formamos o vetor $|3, +1\rangle \in \{|j, z\rangle\}$:

$$|3, +1\rangle = c[1 + I]|--+-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|--+-\rangle + |++-+\rangle) \quad (7.2)$$

Ao representarmos a Hamiltoniana nesta base, formaram-se dois blocos de 8×8 , como mostra a Fig. (4), cada um sendo a projeção de H no espaço de estado dos autovetores degenerados de I , sendo bloco superior direito associado ao autovalor -1 e o bloco inferior esquerdo associado ao autovalor $+1$.

$$\begin{bmatrix}
4\kappa - 4 & -g & -g & 0 & -g & 0 & 0 & g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-g & 0 & 0 & -g & 0 & -g & g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-g & 0 & 0 & -g & 0 & g & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -g & -g & -4\kappa & g & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-g & 0 & 0 & g & 0 & -g & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -g & g & 0 & -g & 4\kappa + 4 & 0 & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & g & -g & 0 & -g & 0 & -4\kappa & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
g & 0 & 0 & -g & 0 & -g & -g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4\kappa - 4 & -g & -g & 0 & -g & 0 & 0 & -g \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & -g & 0 & -g & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & -g & 0 & -g & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & -g & -4\kappa & -g & 0 & 0 & -g \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & -g & 0 & -g & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & -g & 0 & -g & 4\kappa + 4 & 0 & -g \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & -g & 0 & -g & 0 & -4\kappa & -g \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -g & 0 & 0 & -g & 0 & -g & -g & 0
\end{bmatrix}$$

Figura 4 – Hamiltoniana de Ising representada na base $\{|j, z\rangle\}$. O bloco superior esquerdo (destacado em azul escuro), está associado ao autovalor -1 e o bloco inferior direito (destacado em azul claro) ao autovalor +1.

Depois de aplicar a simetria de Inversão, foram aplicadas as simetrias de Translação ao Quadrado (T^2) e Reflexão (W). Isso foi feito aplicando primeiramente a Eq. (4.10) à base $\{|j, z\rangle\}$, e em seguida a Eq. (4.8), resultando na base $\{|j, w, t, z\rangle\}$.

Para ilustrar esses passos, vamos criar o vetor $|1, +1, +1\rangle$ a partir do vetor $|3, +1\rangle$:

$$|1, +1, +1\rangle = c[1 + T^2]|3, +1\rangle \quad (7.3)$$

$$|1, +1, +1\rangle = \frac{1}{2}(|--+-\rangle + |++-+\rangle + |+- --\rangle + |-+++\rangle) \quad (7.4)$$

em seguida, vamos criar o vetor $|3, +1, +1, +1\rangle$:

$$|3, +1, +1, +1\rangle = c[1 + W]|1, +1, +1\rangle \quad (7.5)$$

$$\begin{aligned}
|3, +1, +1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}(&|--+-\rangle + |++-+\rangle + |+- --\rangle + |-+++\rangle \\
&+ |-+- --\rangle + |+- ++\rangle + |-- --\rangle + |++++\rangle)
\end{aligned} \quad (7.6)$$

A representação da Hamiltoniana nesta base apresentou quatro blocos 2×2 e um bloco 5×5 , como mostra a Fig. (5). Além disso, foi possível identificar 3 autovalores nulos, cujo autovetores correspondentes são:

$$\begin{bmatrix}
0 & -2g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-2g & 4\kappa + 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -4\kappa & 2g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 2g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4\kappa - 4 & -2g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4\kappa - 4 & 0 & -2g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4\kappa & -2g & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2g & -2g & 0 & -2g & -2g & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2g & 4\kappa + 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2g & 0 & -4\kappa & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2g & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2g & -4\kappa \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{bmatrix}$$

Figura 5 – Hamiltoniana de Ising representada na base $\{|j, w, t, z\rangle\}$.

$$\left\{ \begin{array}{l}
|1, -1, +1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}(|--+-\rangle + |++-+\rangle + |+- --\rangle + |-+++\rangle \\
\quad - |-+- -\rangle - |+- ++\rangle - |-- --\rangle - |++++\rangle) \\
|1, -1, -1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}(-|--+-\rangle - |++-+\rangle + |+- --\rangle + |-+++\rangle \\
\quad + |-+- -\rangle + |+- ++\rangle - |-- --\rangle - |++++\rangle) \\
|1, +1, -1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}(|--+-\rangle + |++-+\rangle - |+- --\rangle - |-+++\rangle \\
\quad + |-+- -\rangle + |+- ++\rangle - |-- --\rangle - |++++\rangle)
\end{array} \right. \quad (7.7)$$

Em particular, é importante analisar o bloco 5×5 , que é a representação de H no subespaço dos autovetores $|j, +1, +1, +1\rangle$. A sua base é formada pelos seguintes vetores:

$$\left\{ \begin{array}{l}
|1, +1, +1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|++++\rangle + |-- --\rangle) \\
|2, +1, +1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|++- -\rangle + |-- ++\rangle) \\
|3, +1, +1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}(|--+-\rangle + |++-+\rangle + |+- --\rangle + |-+++\rangle \\
\quad + |-+- -\rangle + |+- ++\rangle + |-- --\rangle + |++++\rangle) \\
|4, +1, +1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+- +-\rangle + |-+- ++\rangle) \\
|5, +1, +1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+- -+\rangle + |-+- -\rangle)
\end{array} \right. \quad (7.8)$$

É possível reduzir ainda mais esse bloco ao formar uma nova base substituindo $|2, +1, +1, +1\rangle$ por $|2, +1, +1, +1\rangle + |5, +1, +1, +1\rangle$ e $|5, +1, +1, +1\rangle$ por $|2, +1, +1, +1\rangle - |5, +1, +1, +1\rangle$, e normalizando os vetores resultantes. É importante destacar que ao realizar

$$\begin{bmatrix} 4\kappa - 4 & 0 & -2g & 0 & 0 \\ 0 & -4\kappa & -2\sqrt{2}g & 0 & 0 \\ -2g & -2\sqrt{2}g & 0 & -2g & 0 \\ 0 & 0 & -2g & 4\kappa + 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -4\kappa \end{bmatrix}$$

Figura 6 – Decomposição do bloco 5×5

essas substituições, as simetrias não são perdidas, pois estamos somando os autovetores com os mesmos autovalores. Com isso, o bloco é decomposto em um bloco 4×4 e um bloco 1×1 o qual resulta no autovalor -4κ , como mostra a Fig. (6).

A base do bloco 4×4 é formada pelos vetores:

$$\begin{cases} |1, +1, +1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|++++\rangle + |-- --\rangle) \\ |2, +1, +1, +1\rangle = \frac{1}{2}(|++--\rangle + |--++\rangle + |+- -+\rangle + |-++-\rangle) \\ |3, +1, +1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}(|--+-\rangle + |++-+\rangle + |+- -+\rangle + |-++-\rangle \\ \quad + |-+-+\rangle + |+-++\rangle + |-- -+\rangle + |+++-\rangle) \\ |4, +1, +1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-+-\rangle + |-+-+\rangle) \end{cases} \quad (7.9)$$

Para simplificar a notação, a partir de agora os vetores $|j, +1, +1, +1\rangle$ da Eq. (7.9), para $j = 1, 2, 3, 4$, serão representados apenas por $|\gamma_j\rangle$.

No início, nosso objetivo era encontrar expressões analíticas para os autovalores e autovetores deste bloco, mas não conseguimos atingi-lo. Assim, recorreremos a uma solução numérica, definindo valores para g e κ e encontrando a energia do estado fundamental e o autovetor correspondente ($|\Psi_0\rangle$), que sempre estavam neste bloco independentemente dos valores dos parâmetros de controle.

Dessa forma, apesar não conseguirmos uma expressão para o estado fundamental, sabemos que ele tem a forma:

$$|\Psi_0\rangle = p_1(\kappa, g)|\gamma_1\rangle + p_2(\kappa, g)|\gamma_2\rangle + p_3(\kappa, g)|\gamma_3\rangle + p_4(\kappa, g)|\gamma_4\rangle \quad (7.10)$$

onde os coeficientes normalizados $p_j(\kappa, g)$ dos vetores $|\gamma_j\rangle$, são funções que dependem de κ e g .

Assim, a utilização das simetrias simplificou o trabalho de diagonalização da Hamiltoniana. Ao invés de lidar com uma matriz de ordem 16, foi possível trabalhar com matrizes de ordem 2 e 5. Embora o tamanho da matriz original não seja excessivamente

grande e possa ser facilmente diagonalizada com métodos numéricos, o objetivo aqui é ilustrar como a utilização de simetrias pode tornar o processo mais simples e eficiente.

7.2 Inspeção da função de onda

Tendo encontrado o estado fundamental, foi investigado quais componentes da base padrão eram mais prováveis para determinados valores de κ e g . É importante destacar que, devido às simetrias de translação geradas pelas condições periódicas de contorno, todos os estados que são uma translação uns dos outros são, de fato, equivalentes do ponto de vista da simetria e terão o mesmo coeficiente nas autofunções. Além disso, todos os estados que são resultantes de uma aplicação de inversão de spins também são equivalentes e possuirão os mesmos coeficientes.

Assim, uma vez que os estados pertencentes aos conjuntos

$$\{|++++\rangle, |-- --\rangle\} \quad (7.11)$$

$$\{|++- -\rangle, |+- -+\rangle, |-++-\rangle, |--++\rangle\} \quad (7.12)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} |+++-\rangle, |++-+\rangle, |+-++\rangle, |+- - -\rangle, \\ |-+++\rangle, |-+- -\rangle, |--+-\rangle, |-- - +\rangle \end{array} \right\} \quad (7.13)$$

$$\{|+-+-\rangle, |-+-+\rangle\} \quad (7.14)$$

são equivalentes e representam os mesmos macroestados, podemos escolher os vetores $|\gamma_1\rangle$, $|\gamma_2\rangle$, $|\gamma_3\rangle$ e $|\gamma_4\rangle$ como representantes desses macroestados, já que são formados pela soma dos vetores desses conjuntos, respectivamente. Dessa forma, em vez de analisar a probabilidade de obter cada estado individualmente, podemos avaliar a probabilidade de obter os macroestados.

A Figura (7) exibe a distribuição de probabilidade dos macroestados $\{|\gamma_j\rangle\}$ para diferentes valores dos parâmetros de controle. É possível observar que para baixos valores de g , os estados em que todos os spins apontam na mesma direção ($|\gamma_1\rangle$) apresentam maior probabilidade de ocorrência, o que significa que a fase mais provável do sistema é a ferromagnética para valores de $k < 0,5$. Por outro lado, para valores de $k > 0,5$, estados em que dois spins vizinhos apontam na mesma direção e outros dois em direções opostas ($|\gamma_2\rangle$) são mais prováveis, indicando que a fase mais provável do sistema é a antiferase.

Além disso, à medida que o valor de g aumenta, a probabilidade de ocorrência dos estados em que um spin aponta em uma direção e os outros apontam na direção oposta ($|\gamma_3\rangle$), aumenta para valores de κ próximos de 0,5. Esses estados tornam-se os mais

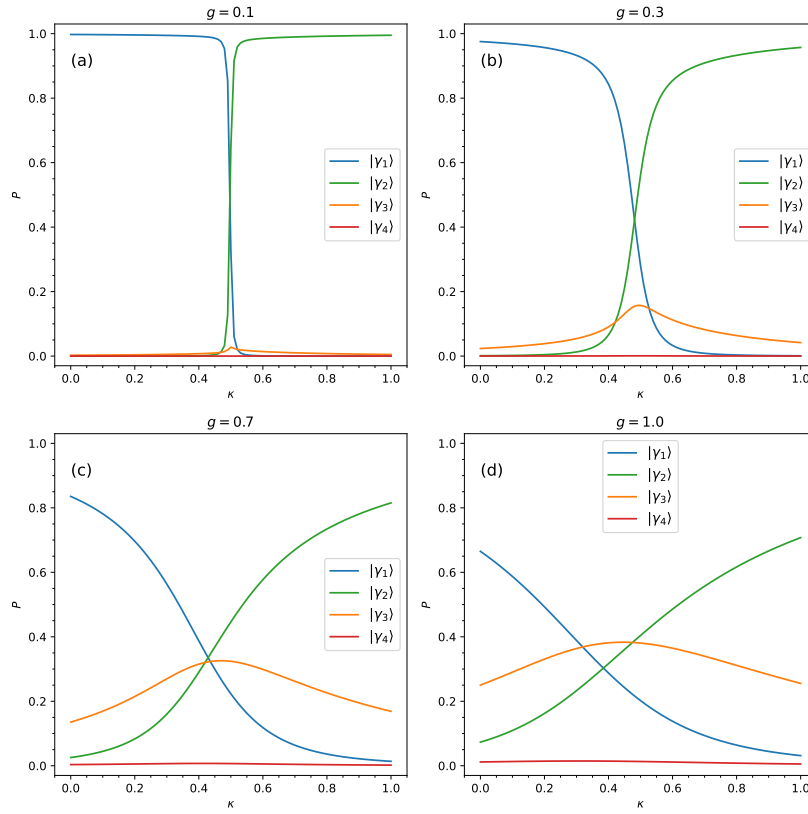


Figura 7 – Distribuição de Probabilidade dos estados em função do parâmetro de interação dos segundos vizinhos κ para (a) $g = 0, 1$, (b) $g = 0, 3$, (c) $g = 0, 7$ e (d) $g = 1, 0$.

prováveis de ocorrerem quando os spins apontam na mesma direção do campo, indicando que a fase paramagnética é a mais provável nestas condições.

Já os estados em que os spins vizinhos apontam para direções opostas ($|\gamma_4\rangle$) são os menos prováveis de ocorrerem, sugerindo que a fase antiferromagnética é muito pouco provável de acontecer para o modelo de ANNNI.

Vale a pena notar que, mesmo a um sistema tão pequeno quanto $L = 4$, as fases e as regiões de transição entre elas já estão bem definidos.

7.3 Iterações do método de Lanczos

A Tabela 1 apresenta os valores da energia do estado fundamental (convergidados até o último dígito apresentando) para diferentes combinações de κ e g , assim como o número de iterações necessárias para atingir esse valor em uma cadeia de Ising de 16 sítios. É importante destacar que a ordem da matriz Hamiltoniana nesse caso é de 65536, no entanto, o número máximo de iterações necessárias para se obter o autovalor foi de apenas 152. Isso evidencia a eficiência do método de Lanczos na obtenção de autovalores de matrizes de grande ordem.

κ	g	E_0	Nº de iterações
0,1	0,2	-14,578554547443995	36
0,1	0,8	-17,541943243816080	67
0,5	0,2	-9,532983586622839	130
0,5	0,8	-16,433697163977904	54
0,9	0,2	-14,578843746918686	152
0,9	0,8	-18,272586638181547	68

Tabela 1 – Valores da energia do estado fundamental (E_0) (convergidos até o último dígito apresentado), obtidos através do método do Lanczos, para determinados valores do parâmetro de interação de segundos vizinhos (κ) e parâmetro de interação com o campo magnético transversal (g), para uma cadeia de 16 sítios.

7.4 Valores médios dos Observáveis

Uma vez identificado o estado fundamental para cadeias de 4, 8 e 16 sítios, é possível caracterizar as fases do modelo para diferentes combinações de κ e g por meio da análise das funções de correlação de spins no espaço real, baseadas na relação de orientação entre o spin do sítio 0 e o spin do sítio a uma distância r dele na cadeia, descritas na equação (6.1), e seus componentes de fator de estrutura magnética, descritos na equação (6.2).

κ	g	Fase
0,1	0,2	Ferromagnética
0,1	0,8	Ferromagnética (próximo à transição)
0,5	0,2	Paramagnética (próximo à transição)
0,5	0,8	Paramagnética
0,9	0,2	Antifase
0,9	0,8	Antifase (próximo à transição)

Tabela 2 – Fases que o sistema pode assumir para determinados valores do parâmetro de interação de segundos vizinhos (κ) e parâmetro de interação com o campo magnético transversal (g).

Observando as Figuras 8, 9 e 10, podemos notar que, para o ponto com $\kappa = 0,1$ e $g = 0,2$, o valor da correlação $S^{zz}(r)$ é o mesmo para todos os sítios, indicando que os spins estão alinhados na mesma direção em relação à orientação z , o que caracteriza a fase ferromagnética. Já para o ponto $\kappa = 0,9$ e $g = 0,2$, a curva de $S^{zz}(r)$ é oscilatória, sugerindo que os spins estão invertendo suas orientações com seus segundos vizinhos, o que caracteriza a fase antifase. Por fim, para o ponto $\kappa = 0,5$ e $g = 0,8$, os valores das correlações $S^{xx}(r)$ entre os sítios são próximos, sugerindo que os spins estão se alinhando na direção x , o que caracteriza a fase paramagnética.

Quanto ao ponto com $\kappa = 0,1$ e $g = 0,8$, podemos perceber que ele apresenta valores positivos em $S^{zz}(r)$ e, portanto, está na fase ferromagnética. No entanto, seu

comportamento não é tão característico quanto o do ponto $\kappa = 0,1$ e $g = 0,2$, e sua análise sugere tendências para o comportamento paramagnético. Analogamente, os pontos $\kappa = 0,5$ e $g = 0,2$ e $\kappa = 0,9$ e $g = 0,8$ estão localizados nas fases paramagnética e antifase, respectivamente, mas não apresentam comportamentos tão distintos quanto os demais pontos nessas fases, sugerindo que estão em uma região próxima a uma transição.

Dessa forma, as figuras da correlação dos spins permitem identificar as fases do modelo de Ising, sendo a fase ferromagnética caracterizada por valores de $S^{zz}(r)$ positivos e iguais para todos os sítios, a fase antifásica por curvas oscilatórias em $S^{zz}(r)$, e a fase paramagnética por valores próximos em $S^{xx}(r)$. No entanto, pontos próximos às transições de fases podem não apresentar comportamentos tão distintos, indicando uma região de incerteza em relação à classificação de fase.

Os cálculos dos fatores de estrutura magnética, apresentados nas Figuras 11, 12 e 13, confirmam as análises das correlações. Quando $\kappa = 0,2$, há um pico de valor em $\tilde{S}^{zz}$ quando o número de onda é nulo. Em contrapartida, para $\kappa = 0,9$, há picos em $\pi/2$ em $\tilde{S}^{zz}$. Para $\kappa = 0,5$, não há picos em $\tilde{S}^{zz}$, mas um pico em $\tilde{S}^{xx}$ é observado para o número de onda igual a zero. Em relação a $g = 0,8$, picos menores são observados em $\tilde{S}^{xx}$ no mesmo valor, sugerindo que está próximo a uma região de transição com a fase paramagnética.

Vale ressaltar que, embora seja possível observar as características das fases por meio das correlações e fatores de estrutura para a cadeia de 4 sítios, as características foram mais claramente visualizadas nas cadeias de 8 e 16 sítios.

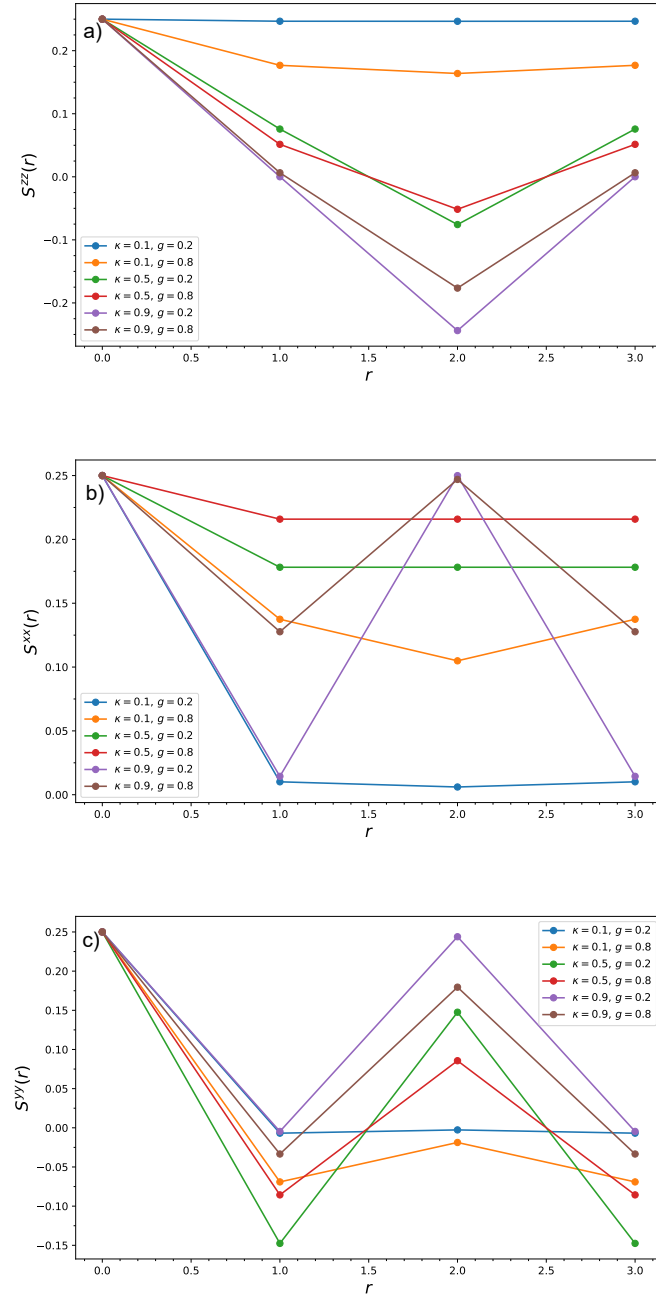


Figura 8 – Resultados obtidos para 4 sítios, para diferentes combinações de κ e g : (a) dependência espacial da função de correlação- zz dos momentos magnéticos localizados; (b) dependência espacial da função de correlação- xx ; (c) dependência espacial da função de correlação- yy . Todos obtidos da Eq. (6.1).

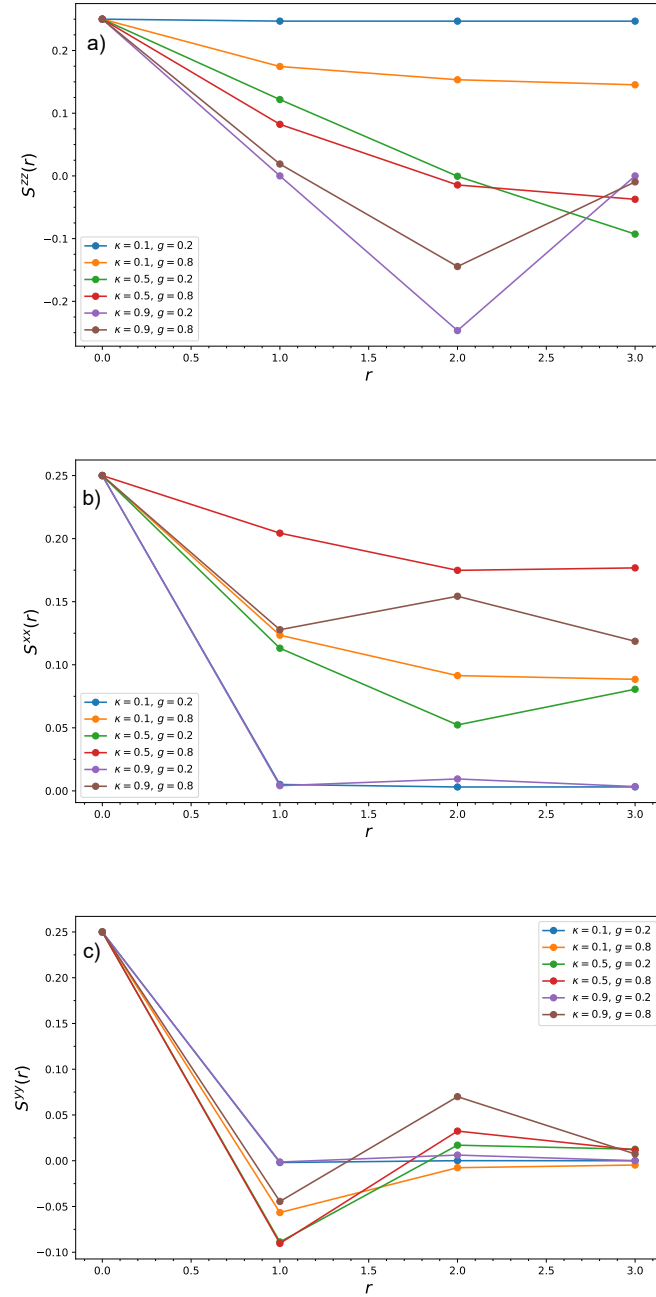


Figura 9 – Resultados obtidos para 8 sítios, para diferentes combinações de κ e g : (a) dependência espacial da função de correlação- zz dos momentos magnéticos localizados; (b) dependência espacial da função de correlação- xx ; (c) dependência espacial da função de correlação- yy . Todos obtidos da Eq. (6.1).

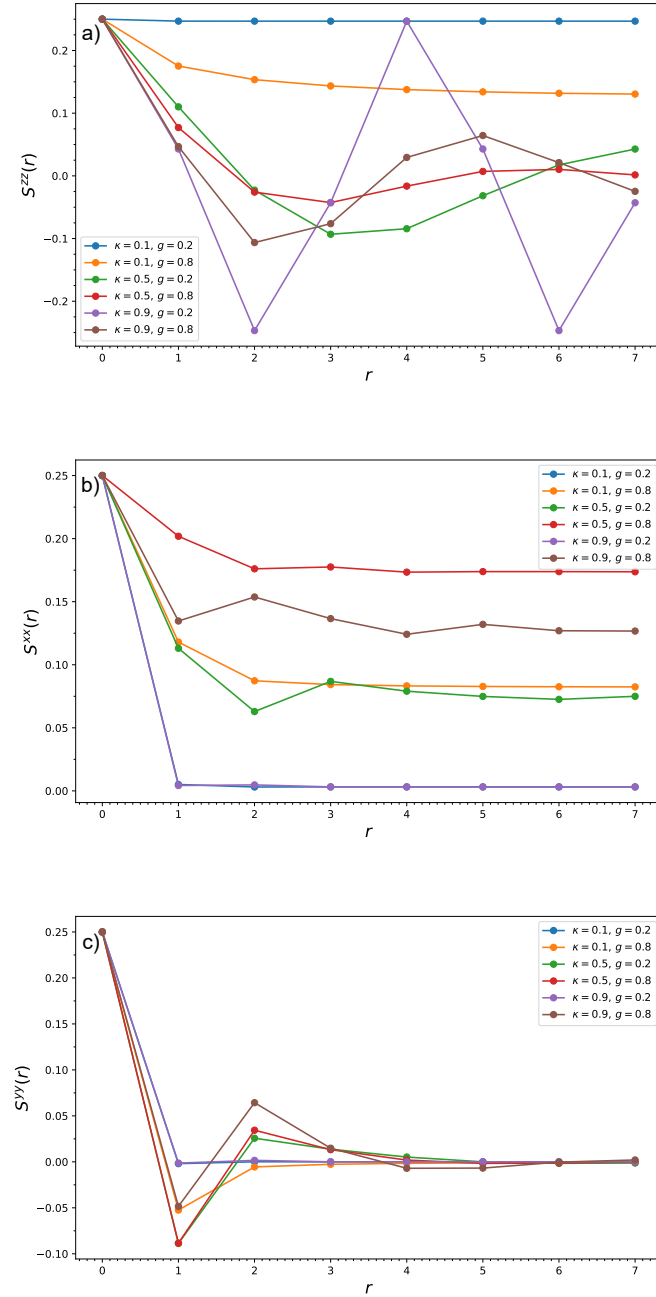


Figura 10 – Resultados obtidos para 16 sítios, para diferentes combinações de κ e g : (a) dependência espacial da função de correlação- zz dos momentos magnéticos localizados; (b) dependência espacial da função de correlação- xx ; (c) dependência espacial da função de correlação- yy . Todos obtidos da Eq. (6.1).

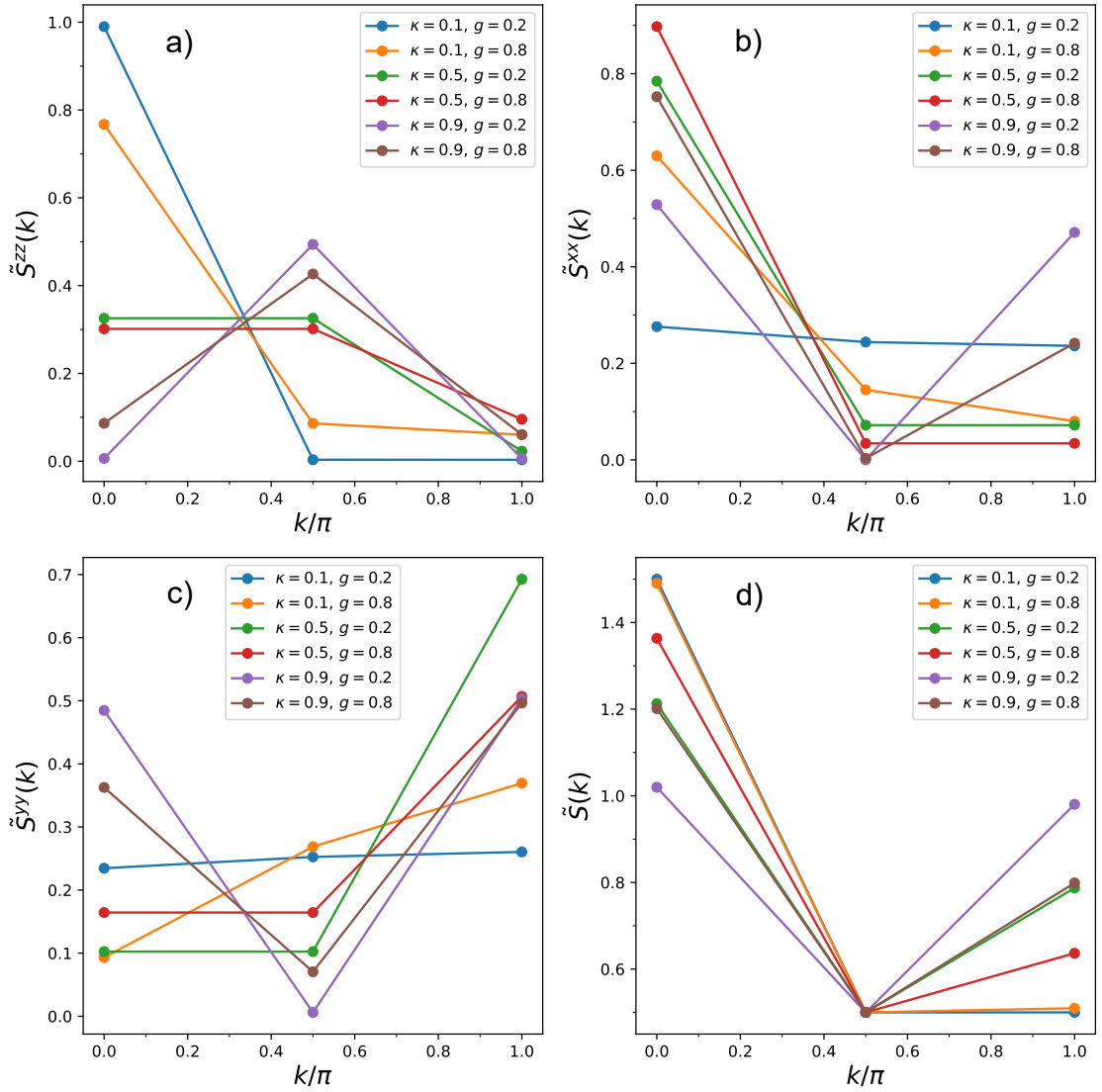


Figura 11 – Resultados obtidos para 4 sítios, para diferentes combinações de κ e g : (a) do fator de estrutura $\tilde{S}^{zz}(k)$ em função do número de onda k ; (b) do fator de estrutura $\tilde{S}^{xx}(k)$ em função do número de onda k ; (c) do fator de estrutura $\tilde{S}^{yy}(k)$ em função do número de onda k ; (d) soma dos fatores de estruturas $\tilde{S}(k)$ em função do número de onda k .

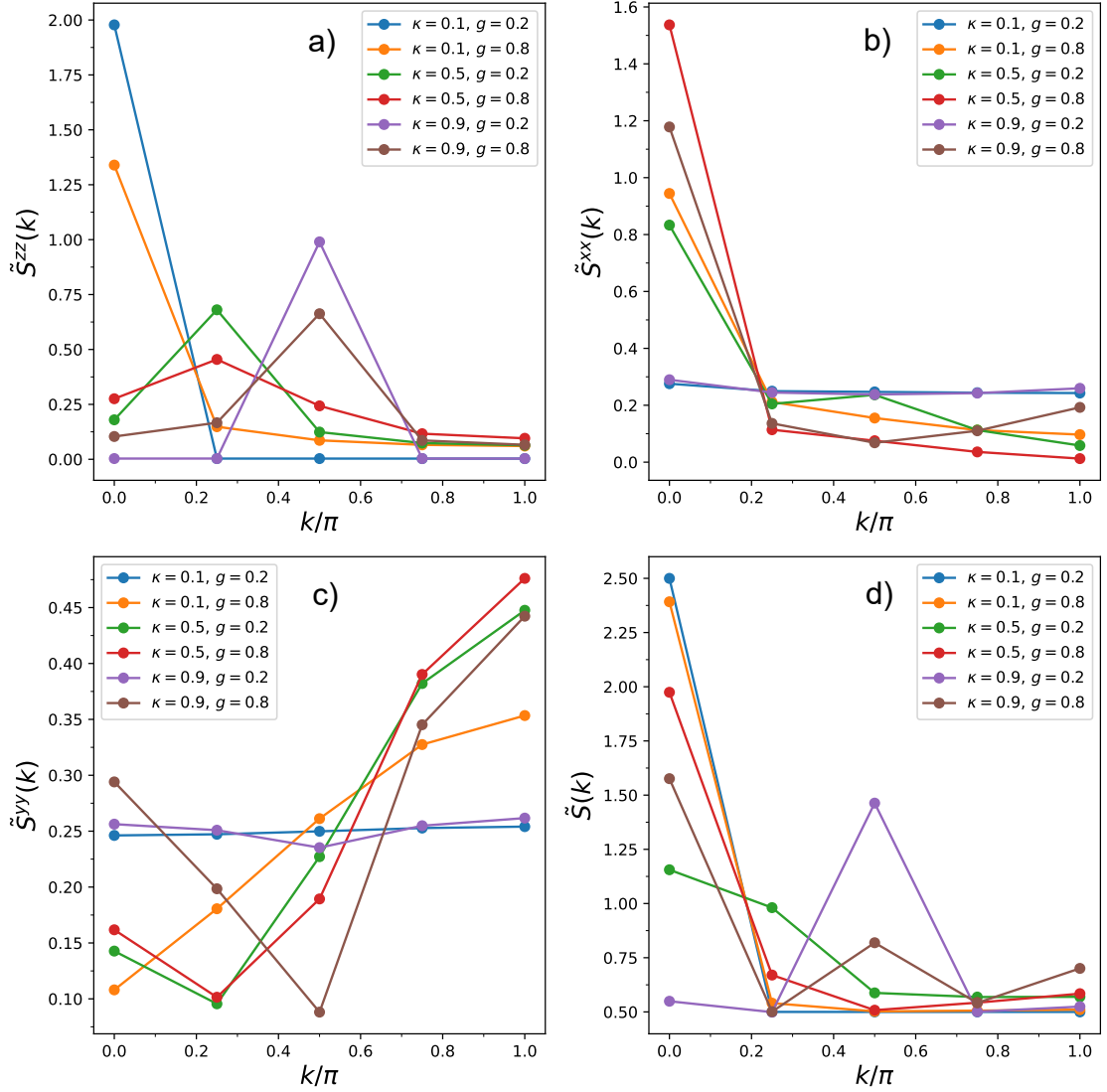


Figura 12 – Resultados obtidos para 8 sítios, para diferentes combinações de κ e g : (a) do fator de estrutura $\tilde{S}^{zz}(k)$ em função do número de onda k ; (b) do fator de estrutura $\tilde{S}^{xx}(k)$ em função do número de onda k ; (c) do fator de estrutura $\tilde{S}^{yy}(k)$ em função do número de onda k ; (d) soma dos fatores de estruturas $\tilde{S}(k)$ em função do número de onda k .

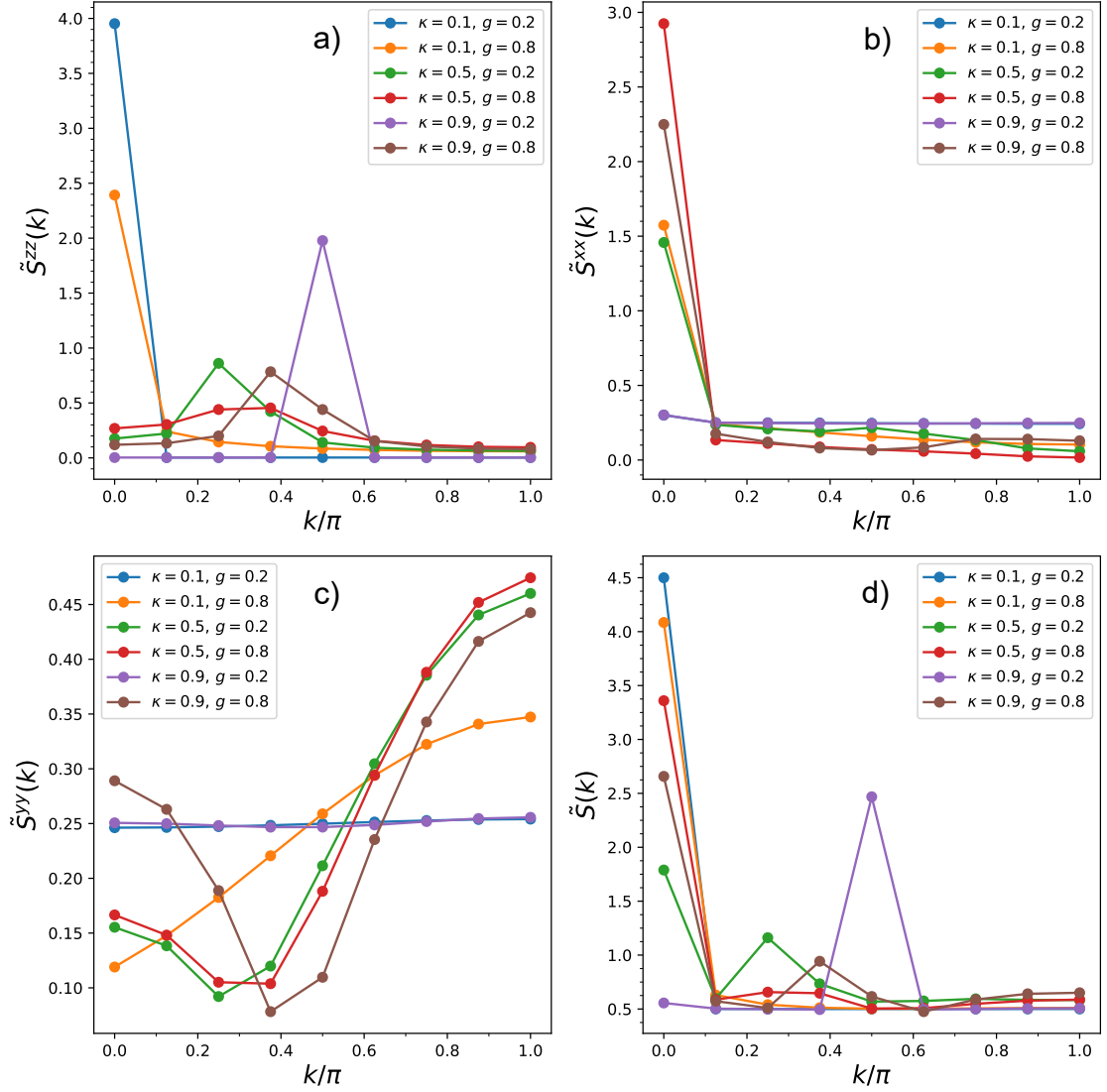


Figura 13 – Resultados obtidos para 16 sítios, para diferentes combinações de κ e g : (a) do fator de estrutura $\tilde{S}^{zz}(k)$ em função do número de onda k ; (b) do fator de estrutura $\tilde{S}^{xx}(k)$ em função do número de onda k ; (c) do fator de estrutura $\tilde{S}^{yy}(k)$ em função do número de onda k ; (d) soma dos fatores de estruturas $\tilde{S}(k)$ em função do número de onda k .

8 CONCLUSÃO

Neste trabalho, foi possível estudar o Modelo de Ising Quântico Anisotrópico com Interações de Segundos Vizinhos (ANNNI) de forma detalhada. O estudo das simetrias e a utilização do método de Lanczos permitiram obter resultados precisos e confiáveis. A utilização de técnicas teóricas, como a análise das simetrias, permitiu uma diagonalização eficiente do modelo. Além disso, o método de Lanczos demonstrou ser uma ferramenta eficaz para obter o estado fundamental do modelo, obtendo a energia e o estado característico do estado fundamental com um baixo número de iterações se comparado ao tamanho da matriz. Ao final do trabalho, foi possível identificar as principais fases e ordens presentes no modelo, incluindo a ferromagnética, a paramagnética e a antifase.

Referências

- [1] SELKE, W. The annni model — theoretical analysis and experimental application. *Physics Reports*, v. 170, n. 4, p. 213–264, 1988. ISSN 0370-1573. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157388901408>>. Citado 3 vezes nas páginas 8, 14 e 15.
- [2] CHANDRA, A. K.; DASGUPTA, S. Floating phase in the one-dimensional transverse axial next-nearest-neighbor ising model. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 75, p. 021105, Feb 2007. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.75.021105>>. Citado 2 vezes nas páginas 8 e 16.
- [3] SOLÉ, R. *Phase transitions*. [S.l.]: Princeton University Press, 2011. v. 3. Citado na página 13.
- [4] SACHDEV, S. *Quantum Phase Transitions*. 2. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2011. Citado na página 13.
- [5] SONDHI, S. L. et al. Continuous quantum phase transitions. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 69, p. 315–333, Jan 1997. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.69.315>>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 18.
- [6] ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, v. 31, n. 1, Feb 1925. Citado na página 13.
- [7] HEISENBERG, W. Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, v. 49, n. 9, p. 619–636, Sep 1928. Citado na página 13.
- [8] HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, The Royal Society London, v. 276, n. 1365, p. 238–257, 1963. Citado na página 13.
- [9] BONCA, J. et al. *Open problems in strongly correlated electron systems*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2001. v. 15. Citado na página 13.
- [10] FULDE, P. *Electron correlations in molecules and solids*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2012. Citado na página 13.
- [11] SINGH, S. P. The ising model: Brief introduction and its application. In: SIVA-SANKARAN, S.; NAYAK, P. K.; GÜNAY, E. (Ed.). *Metastable, Spintronics Materials*

- and Mechanics of Deformable Bodies*. Rijeka: IntechOpen, 2020. cap. 8. Disponível em: <<https://doi.org/10.5772/intechopen.90875>>. Citado na página 13.
- [12] SUZUKI, S.; INOUE, J.-i.; CHAKRABARTI, B. K. *Quantum Ising phases and transitions in transverse Ising models*. [S.l.]: Springer, 2012. v. 862. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 15.
- [13] CANABARRO, A. et al. Unveiling phase transitions with machine learning. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 100, p. 045129, Jul 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.045129>>. Citado 2 vezes nas páginas 16 e 18.
- [14] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. Quantum mechanics, volume 1. *Quantum Mechanics*, v. 1, 1986. Citado na página 17.
- [15] MALVEZZI, A. L. An introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems. *Brazilian journal of physics*, v. 33, p. 55–72, 2003. Citado 3 vezes nas páginas 18, 19 e 20.
- [16] GOLUB, G. H.; LOAN, C. F. V. *Matrix computations*. [S.l.]: JHU press, 2013. Citado na página 20.