

14/12/95

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

1486
vermelho
sua

MÉTODO DE MONTE CARLO PARA SISTEMAS QUÂNTICOS

RICARDO ANDREAS SAUERWEIN

SBI-IFUSP



305M810T2364



Tese de Doutorado
submetida ao Instituto de Física
da Universidade de São Paulo

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Mário José de Oliveira

Comissão Examinadora: Prof. Dr. Mário José de Oliveira (orientador)
Prof. Dr. Alex Antonelli
Prof. Dr. Francisco G. Brady Moreira
Prof. Dr. Paulo Murilo C. Oliveira
Prof. Dr. Silvio R. A. Salinas

Iberê Luiz Caldas

São Paulo
1995

Prof. Iberê Luiz Caldas
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

530013

S355m

D

ex. 1

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

MÉTODO DE MONTE CARLO PARA
SISTEMAS QUÂNTICOS



RICARDO ANDREAS SAUERWEIN

Tese de Doutorado
submetida ao Instituto de Física
da Universidade de São Paulo

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Sauerwein, Ricardo Andreas
Método de Monte Carlo para sistemas quânticos.
São Paulo, 1995.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo.
Instituto de Física. Departamento de Física Geral.
Área de Concentração: Física do Estado Sólido
Orientador: Prof. Dr. Mário José de Oliveira.

Unitermos: 1. Método de Monte Carlo; 2. Sistemas quânticos de spin; 3. Modelo de Heisenberg; 4. Entropia residual.

SP/IF/SBI-62/95

REPUBLICA DE GUATEMALA

MINISTERIO DE ECONOMIA Y COMERCIO

SECRETARÍA DE ASESORIA TÉCNICA

SENFV/SR



Ing. L. [Name]
[Address]
[City]

Ministerio de Economía y Comercio
Calle [Address]
Ciudad de Guatemala, Guatemala

Aos meus pais

1

Agradecimentos

Agradeço ao Prof. Dr. Mário José de Oliveira pela sua sempre atenciosa orientação.

Agradeço a todos os amigos do Grupo de Mecânica Estatística do IFUSP pelo privilégio de ter com eles trabalhado e em especial aos amigos de todas as horas Cristiano Mattos, Javier Satulovsky, Mário Tamashiro e Roberta Simonetti.

Finalmente agradeço ao CNPq pela bolsa de doutorado concedida sem a qual este trabalho não poderia ter sido realizado.

Resumo

As propriedades do estado fundamental do modelo de Heisenberg antiferromagnético quântico de spin-1/2 na rede quadrada e na rede cúbica espacialmente anisotrópica são investigadas através de um novo método de Monte Carlo, baseado na estimativa do maior autovalor de uma matriz de elementos não negativos. A energia do estado fundamental e a magnetização “staggered” destes sistemas são calculadas em redes relativamente grandes com até 24×24 sítios para o caso de redes quadradas e $8 \times 8 \times 8$ sítios para o caso de redes cúbicas. O método desenvolvido também pode ser usado como um novo algoritmo para a determinação direta da entropia de sistemas de spins de Ising através de simulações usuais de Monte Carlo. Usando este método, calculamos a entropia do antiferromagneto de Ising na presença de um campo magnético externo nas redes triangular e cúbica de face centrada.

Abstract

The ground state properties of the antiferromagnetic quantum Heisenberg model with spin- $1/2$ defined on a square lattice and on a cubic lattice with spatial anisotropy are investigated through a new Monte Carlo method, based on the estimation of the largest eigenvalue of a matrix with nonnegative elements. The ground state energy and the staggered magnetization of these systems are calculated in relatively large lattices with up to 24×24 sites for the square lattices and $8 \times 8 \times 8$ sites for cubic lattices. The method developed can also be used as a new algorithm for the direct determination of the entropy of Ising spin systems through ordinary Monte Carlo simulations. By using this method we calculate the entropy of the Ising antiferromagnetic in the presence of a magnetic field in the triangular and face centered cubic lattices.

Índice

1. Introdução	1
2. Métodos de Monte Carlo	4
2.1 Introdução	4
2.2 Variáveis Aleatórias	6
2.3 Números Pseudo-Aleatórios	8
2.4 Estimativas de Monte Carlo	8
2.5 Cadeias de Markov	12
2.6 Simulações de M. C. em Mecânica Estatística	16
2.7 Precisão das Estimativas de Monte Carlo	17
3. O Método	21
4. Sistemas de Spins de Ising	31
4.1 Introdução	31
4.2 O Algoritmo	35
4.3 Antiferromagneto de Ising na Rede Triangular	39
4.3.1 Resultados	41
4.4 Antiferromagneto de Ising na Rede FCC	43
4.4.1 Resultados	45
5. Modelo de Heisenberg	48
5.1 O Estado Fundamental	56
5.2 A Matriz T	63

6. Estado Fundamental do Antiferromagneto de Heisenberg na Rede Quadrada ..	66
6.1 O Algoritmo	68
6.2 Resultados	72
7. Estado Fundamental do Antiferromagneto de Heisenberg na Rede Cúbica	80
7.1 Introdução	80
7.2 O Algoritmo	82
7.3 Resultados	84
7.3.1 Sistema Isotrópico	84
7.3.2 Anisotropia Planar	86
7.3.3 Anisotropia Axial	90
8. Conclusão	93
Referências	95
Anexo I	100

Capítulo 1

Introdução

Uma das mais freqüentes formas matemáticas encontrada durante o estudo de sistemas físicos é aquela dada pelas equações de autovalores. A mecânica quântica, a mecânica clássica de Hamilton, bem como sistemas de mecânica estatística usando a técnica da matriz de transferência têm basicamente esta formulação. Alguns destes problemas podem ser representados por matrizes de elementos não negativos que possuem propriedades especiais. Neste caso, o teorema de Perron-Frobenius [*Gantmacher, 1960*] garante que as potências destas matrizes são dominadas pelo seu maior autovalor, ou seja, temos

$$T_{ij}^N \sim (\phi_0)_i \lambda_0^N (\phi_0)_j, \quad (1.1)$$

para $N \rightarrow \infty$, onde T_{ij}^N é o elemento i, j da N -ésima potência da matriz quadrada de elementos não negativos T , λ_0 seu maior autovalor e ϕ_0 seu respectivo autovetor. Esta propriedade é usada largamente em cálculos analíticos e numéricos. Um exemplo de cálculo analítico é a determinação do limite termodinâmico da função de partição de sistemas de spins de Ising calculada pela técnica da matriz de transferência [*Thompson, 1981*]. Um exemplo de cálculo numérico é a determinação do maior autovalor de T pelo método da potência [*Press and Teukolsky, 1992*], que consiste na multiplicação sucessiva da matriz T a partir de um vetor inicial qualquer. Entretanto, até o trabalho de

de Oliveira [1993] havia nesta expressão uma propriedade ainda inexplorada. O fato da matriz T não possuir elementos negativos permite que uma probabilidade seja definida e, se um processo estocástico for construído para simulá-la, teremos um meio de calcular o autovalor dominante de T através de amostragens estatísticas.

É sempre interessante quando temos uma nova abordagem para velhos problemas, mas um método de Monte Carlo capaz de estimar o maior autovalor de uma matriz de elementos não negativos seria apenas mais uma curiosidade se não pudesse ser aplicado em problemas relevantes. Como dissemos no início, a formulação dos problemas em sistemas quânticos é feita na forma de equações de autovalores, entretanto somente um pequeno grupo de operadores quânticos satisfazem a restrição de possuir uma matriz de elementos não negativos. Este é o caso do modelo de Heisenberg antiferromagnético quântico bidimensional de spin $-1/2$ que tem seu estado fundamental apontado como o sistema isolante precursor de materiais supercondutores a alta temperatura como o La_2CuO_4 [Menousakis, 1991], [Barnes, 1991]. Outra aplicação do método pode ser feita durante simulações de Monte Carlo usuais de sistemas de spins de Ising. Neste caso o método pode ser visto como um algoritmo direto para a estimativa da entropia destes sistemas.

Neste trabalho, nós vamos aplicar este novo método de Monte Carlo tanto na investigação do estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg quântico de spin $-1/2$ quanto na determinação da entropia de sistemas de spins de Ising. O trabalho está dividido em capítulos que possuem uma seqüência definida, mas que pretendem ser uma leitura mais ou menos autônoma. Desta forma, com exceção da apresentação de nosso método, iniciamos cada capítulo com uma breve introdução do assunto a ser abordado que procura situá-lo junto aos trabalhos disponíveis na literatura.

O Capítulo 2 trata de métodos de Monte Carlo em sua forma mais geral. Em sua introdução aproveitamos a oportunidade para discutir os tipos de abordagens de problemas físicos, analíticas ou numéricas, e a conveniência de uma análise do tipo Monte Carlo. Em seguida apresentamos os fundamentos teóricos compartilhados por toda a família de

métodos de Monte Carlo e que, no Capítulo 3, usamos para o desenvolvimento de nosso método.

Iniciamos o Capítulo 4 mostrando que nosso método de Monte Carlo pode ser usado como um novo método direto para o cálculo da entropia de sistemas de spins de Ising. A seguir, determinamos a entropia dos antiferromagnetos de Ising na presença de um campo externo nas redes triangular e cúbica de face centrada. Os resultados obtidos nesta etapa originaram uma recente publicação [*Sauerwein and de Oliveira, 1995b*].

O Capítulo 5 também tem um caráter geral. Neste capítulo discutimos o modelo de Heisenberg quântico de spin- $1/2$ desde o significado da interação de troca até as propriedades gerais do estado fundamental do caso antiferromagnético. Mostramos ainda que a hamiltoniana de Heisenberg antiferromagnética de spin- $1/2$ pode ser submetida a uma transformação que leva a uma matriz de elementos não negativos e que pode ser estudada com o nosso método de Monte Carlo.

Os Capítulos 6 e 7 são dedicados essencialmente aos resultados que recentemente originaram duas publicações [*Sauerwein and de Oliveira, 1994*], [*Sauerwein and de Oliveira, 1995a*]. No capítulo 6 fazemos a ligação entre nosso método de Monte Carlo com as propriedades do estado fundamental do modelo de Heisenberg antiferromagnético de spin- $1/2$ na rede quadrada. Ainda neste capítulo, mostramos como o algoritmo é de fato construído, ou seja, a forma como devemos iniciar o sistema e como devemos evoluí-lo (o código do programa de computador referente a esta simulação encontra-se no Anexo I). Finalmente, no Capítulo 7 fazemos a generalização deste sistema para um antiferromagneto de Heisenberg de spin- $1/2$ em uma rede cúbica espacialmente anisotrópica.

Capítulo 2

Métodos de Monte Carlo

2.1 Introdução

A solução exata de problemas em física teórica pode ser considerada uma exceção entre os inúmeros problemas existentes. Os poucos casos de problemas resolvidos constituem os conjuntos de paradigmas das diversas áreas da física e envolvem ou sistemas com poucos graus de liberdade, ou interações extremamente simplificadas. Assim na teoria da gravitação clássica preserva-se a interação entre os planetas mas não se resolve exatamente um problema com mais de três corpos celestes. Em física quântica, mesmo considerando como interação intra-atômica apenas forças elétricas coulombianas, e isto já é uma aproximação, não se vai muito além da descrição do átomo de hidrogênio. Em mecânica estatística o sistema mais complexo em que se consegue obter analiticamente o limite termodinâmico é dado pelo modelo de Ising bidimensional. Como a natureza não limita sua descrição a estas simplificações é preciso buscar outros meios capazes de confrontar resultados experimentais a previsões de modelos físicos mais realistas. Basicamente duas abordagens são possíveis. A primeira busca soluções analíticas aproximadas usando teorias perturbativas, métodos de expansões ou mesmo simplificações nos modelos. A segunda forma, a das soluções numéricas, cresce juntamente com o aumento das facilidades computacionais. Estas abordagens são em geral complementares, pois ao preservar a integridade

do modelo físico, os métodos numéricos podem verificar não só até que ponto o sistema modelado se aproxima da realidade experimental, como também podem avaliar o efeito das sucessivas aproximações feitas no tratamento analítico.

Os cálculos numéricos apresentam também seus obstáculos. A mecânica estatística se propõe a descrever sistemas macroscópicos, que possuem da ordem de 10^{23} partículas, a partir da interação em escala atômica. Para efeitos práticos dizemos que sistemas macroscópicos são infinitos, no sentido de satisfazer o limite termodinâmico. Entretanto, os computadores são capazes de lidar apenas com sistemas finitos o que suscita a questão de quantas partículas são necessárias para uma descrição razoável da natureza macroscópica. A solução envolve extrapolações de resultados numéricos obtidos em sistemas de diversos tamanhos usando teorias de escala. Apesar deste caminho para o limite termodinâmico, devemos lembrar que cálculos numéricos diretos em mecânica estatística envolvem na verdade, integrais sobre o espaço de fases do sistema, isto é, o hiper-volume composto por todos os estados acessíveis ao sistema. Supondo, por exemplo, um sistema bidimensional relativamente pequeno formado por 30 spins- $1/2$ localizados, cada sítio apresenta apenas dois estados, logo o espaço de fases deste sistema terá 2^{30} pontos e novamente a mesma limitação prática de tempo e de memória computacional se imporá.

Nasce neste contexto o método de Monte Carlo que através das propriedades dos números aleatórios (por isso a alusão ao famoso cassino de Monte Carlo) é capaz de estimar o valor de integrais múltiplas, sorteando ao acaso apenas uma pequena fração dos pontos do espaço de fases do sistema. Seu uso inicial [*Hammersley and Handscomb*, 1979] relacionava-se à simulação de eventos probabilísticos como a difusão de nêutrons em matéria físsil usada para o desenvolvimento da bomba atômica durante a Segunda Guerra Mundial por von Neumann e Ulam. Logo após o término da guerra eles percebem junto com Fermi que esta técnica podia ser aplicada também a problemas determinísticos.

2.2 Variáveis Aleatórias

Antes de passarmos às técnicas numéricas do tipo Monte Carlo devemos definir o que entendemos por variável aleatória. Inicialmente vamos considerar um espaço discreto e finito de eventos $\Omega = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ aos quais estão associados os pesos $p = \{p_1, p_2, \dots, p_N\}$ sujeitos às duas condições

$$p_i \geq 0 \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^N p_i = 1. \quad (2.1)$$

Dizemos que a variável x' é uma variável aleatória de distribuição de probabilidades p se seu valor depender do acaso e a probabilidade $P(x' = x_i)$ dela assumir o valor x_i de Ω for

$$P(x' = x_i) = p_i \quad (2.2)$$

A extensão desta definição para um espaço contínuo de eventos é imediata. A distribuição de probabilidades $p(x)$ ¹ da variável aleatória contínua x' é a função de domínio Ω que satisfaz condições análogas à 2.1

$$p(x) \geq 0, \text{ qualquer } x \in \Omega \quad \text{e} \quad \int_{\Omega} p(x)dx = 1. \quad (2.3)$$

A probabilidade da variável aleatória x' assumir um valor no intervalo $\{x_1 < x \leq x_2\}$ é dada por

$$P(x' \in \{x_1 < x \leq x_2\}) = \int_{x_1}^{x_2} p(x)dx \quad (2.4)$$

Se $f(x)$ for uma função contínua qualquer de domínio Ω , então a variável $f' = f(x')$ também é uma variável aleatória. Define-se seu valor esperado $\langle f' \rangle_0$ e sua variância σ_0^2

¹A função distribuição de probabilidades normalmente é a função $F(x)$ tal que $P(x' < x) = F(x)$. Neste texto estamos usando esta denominação para o que é conhecido como uma *lei de distribuição*. Está claro que conhecendo uma temos a outra e vice-versa. O nome usual da função $p(x)$ adotada é densidade de distribuição de probabilidade ou função densidade de probabilidade [Gnedenko, 1988].

como sendo as integrais

$$\langle f' \rangle_0 = \int_{\Omega} f(x)p(x)dx, \quad (2.5)$$

$$\sigma_{f'_0}^2 = \langle f' - \langle f' \rangle_0 \rangle_0^2 = \int_{\Omega} f^2(x)p(x)dx - \langle f' \rangle_0^2. \quad (2.6)$$

Um exemplo de distribuição de probabilidades contínua é distribuição de probabilidades normal, definida no intervalo $\Omega = \{-\infty < x < +\infty\}$,

$$p_{normal}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_0^2}\right]. \quad (2.7)$$

De acordo com 2.5 e 2.6 os parâmetros x_0 e σ_0^2 são, respectivamente, o valor esperado e a variância da variável aleatória x' . A distribuição de probabilidades normal desempenha um papel fundamental na teoria das probabilidades pois o teorema central do limite [Gnedenko, 1988] garante que esta é a distribuição para a qual converge a distribuição de probabilidades da soma de n variáveis aleatórias independentes à medida que n vai para infinito. Se x'_1, x'_2, \dots, x'_n for um conjunto de n variáveis aleatórias independentes de mesma distribuição de probabilidades $p(x)$, o teorema central do limite garante que o valor esperado 2.5 pode ser estimado pela média

$$\langle f' \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x'_i), \quad (2.8)$$

sendo a variância de $\langle f' \rangle$ dada por $\sigma_{f'_0}^2/n$, onde $\sigma_{f'_0}^2$ é a variância de f' dada por 2.6. Portanto, estimando a variância de f' por

$$\sigma_{f'}^2 = \langle f^2(x') - \langle f' \rangle^2 \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (f^2(x'_i) - \langle f' \rangle^2), \quad (2.9)$$

podemos estabelecer a precisão da estimativa $\langle f' \rangle$ como sendo

$$\sigma_{\langle f' \rangle} = \frac{\sigma_{f'}}{\sqrt{n}}. \quad (2.10)$$

2.3 Números Pseudo-Aleatórios

O uso de variáveis aleatórias para o cálculo de Monte Carlo só se torna viável se houver um modo eficiente para a obtenção de variáveis aleatórias em grandes quantidades, tipicamente são necessários conjuntos com 10^6 - 10^{10} elementos. Em princípio, esta quantidade não pode ser fornecida por experimentos intrinsecamente probabilísticos devido à escala de tempo envolvida em sua aquisição, de modo que recorre-se às chamadas variáveis *pseudo-aleatórias*, fornecidas em qualquer quantidade desejada por computadores digitais.

Como sabemos, os computadores digitais são máquinas determinísticas, ou seja, a repetição de uma série definida de operações matemáticas sempre resulta no mesmo número (ou seqüência) de saída. A diferença entre esta situação e um experimento intrinsecamente probabilístico que jamais se repete (em um tempo suficientemente longo) tem caráter fundamental. Entretanto, existem vários algoritmos [*Press and Teukolsky*, 1992], [*Sakai*, 1981] que geram números que podem ser utilizados como se fossem aleatórios. O uso destes números na prática é baseado em resultados empíricos que estudam a distribuição e periodicidade de cada gerador de números (pseudo) aleatórios. Também são justificados através de comparações entre resultados exatos e suas respectivas estimativas de Monte Carlo [*Friedberg and Cameron*, 1970], [*Binder*, 1972], [*Landau*, 1976], nas quais não se observou nenhum desvio sistemático advindo da não aleatoriedade dos números gerados pelo computador.

2.4 Estimativa de Monte Carlo

Como dissemos, o método de Monte Carlo é basicamente um modo de estimar integrais definidas, desta forma, apesar de uma integral unidimensional ser melhor resolvida por outros métodos numéricos, ilustraremos com este exemplo as técnicas de Monte Carlo partilhadas também por aplicações mais gerais. Seja $f(x)$ uma função qualquer a qual desejamos integrar no intervalo $\{0 \leq x \leq 1\}$,

$$I = \int_0^1 f(x)dx. \quad (2.11)$$

Evidentemente, a exigência que esta integral exista deve ser satisfeita. O método de Monte Carlo mais simples para estimar I consiste em ver esta integral na forma do valor esperado $\langle f' \rangle_0$

$$I = \langle f' \rangle_0 = \int_0^1 f(x)p(x)dx, \quad (2.12)$$

onde $p(x) = 1, \{0 \leq x \leq 1\}$, é a função distribuição de probabilidades uniforme no intervalo de integração. Se sortearmos um conjunto de n números aleatórios independentes x'_1, x'_2, \dots, x'_n regularmente distribuídos no intervalo $[0, 1]$, podemos estimar I , de acordo com 2.8 por

$$I \simeq \langle f' \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x'_i). \quad (2.13)$$

Calculando a variância $\sigma_{f'}$ dos números aleatórios $f(x'_i)$ por 2.9, temos a precisão da estimativa de Monte Carlo da integral I dada por 2.10

$$\sigma_I = \frac{\sigma_{f'}}{\sqrt{n}}. \quad (2.14)$$

Se a função $f(x)$ for desprezível em grandes regiões de seu intervalo de integração, os números aleatórios x'_i sorteados nestas regiões não contribuirão muito para o resultado da estimativa de Monte Carlo, conseqüentemente a maior parte do esforço gasto em seus sorteios e na avaliação de $f(x'_i)$ será desperdiçado. Neste caso é conveniente escolher uma distribuição de números aleatórios em que a probabilidade de sorteio dos números aleatórios x'_i seja maior onde a função $f(x)$ tenha valores apreciáveis. Para isso, basta introduzir na integral que se deseja estimar uma distribuição de probabilidades não

uniforme que privilegie a região desejada

$$I = \int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)}{p(x)}p(x)dx. \quad (2.15)$$

Ao sortearmos números aleatórios x'_i de acordo com a distribuição $p(x)$, devemos observar que é a média dos números aleatórios obtidos pelas razões $f(x'_i)/p(x'_i)$ que estima I ,

$$I \simeq \left\langle \frac{f'}{p'} \right\rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(x'_i)}{p(x'_i)} \quad (2.16)$$

Esta técnica é chamada “importance sampling” [Binder and Heermann, 1988], pois a amostragem é feita sobre a parte do integrando que efetivamente contribui para a estimativa da integral.

Em mecânica estatística as propriedades de um sistema de N partículas submetido a um banho térmico de temperatura T são dadas por médias térmicas no “ensemble” canônico [Huang, 1987], calculadas através da distribuição de Gibbs

$$p_{gibbs}(x) = \frac{\exp[-\beta\mathcal{H}_N(x)]}{Z}, \quad (2.17)$$

em que x representa um estado do sistema, ou seja, um ponto do espaço (híper-dimensional) de fases do sistema Ω . \mathcal{H}_N é a hamiltoniana do sistema de N partículas (em sistemas finitos deve-se explicitar a dependência de todos os parâmetros extensivos), portanto $\mathcal{H}_N(x)$ é a energia do sistema em seu estado x . A temperatura está contida no fator $\beta = 1/kT$ sendo k a constante de Boltzmann. A normalização da distribuição de Gibbs é a função de partição Z ,

$$Z = \int_{\Omega} \exp[-\beta\mathcal{H}_N(x)]d\Omega. \quad (2.18)$$

A média térmica de um observável qualquer do sistema tem a forma

$$\langle A \rangle_0 = \frac{\int_{\Omega} A(x) \exp[-\beta\mathcal{H}_N(x)]d\Omega}{\int_{\Omega} \exp[-\beta\mathcal{H}_N(x)]d\Omega}. \quad (2.19)$$

Generalizando a expressão acima para uma distribuição de probabilidades de equilíbrio qualquer $p(x)$, temos:

$$\langle A \rangle_0 = \frac{\int_{\Omega} A(x)p(x)d\Omega}{\int_{\Omega} p(x)d\Omega} \quad (2.20)$$

Denominando a probabilidade a ser usada pelo cálculo de Monte Carlo por $p_{mc}(x)$, as integrais acima podem ser estimadas, conforme a prescrição de “*importance sampling*” 2.16, na forma

$$\langle A \rangle_0 \simeq \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A(x'_i) p_{mc}^{-1}(x'_i) p(x'_i)}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n p_{mc}^{-1}(x'_i) p(x'_i)}, \quad (2.21)$$

onde os números aleatórios x'_i são gerados de acordo com a distribuição de probabilidades do cálculo de Monte Carlo $p_{mc}(x)$. Devemos ressaltar que não há nenhum compromisso entre a distribuição de probabilidades $p(x)$ contida na definição 2.20 de $\langle A \rangle_0$ e a distribuição de probabilidades $p_{mc}(x)$. Esta última deve ser vista apenas como um artifício usado para estimar integrais, ou seja, não precisa ter uma interpretação física. No entanto a escolha $p_{mc}(x) = p(x)$ nestes casos parece ser a mais natural, de modo que a expressão 2.21 se apresentará na forma bem mais simples

$$\langle A \rangle_0 \simeq \langle A \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A(x'_i). \quad (2.22)$$

Novamente, a estimativa da precisão de $\langle A \rangle$ dada por 2.10 é $\sigma_{\langle A \rangle} = \sigma_{A'} / \sqrt{n}$, sendo $\sigma_{A'}^2$ a estimativa da variância das variáveis aleatórias $A'_i = A(x'_i)$ 2.9.

Um ponto importante dos cálculos de Monte Carlo é que a precisão de suas estimativas melhora apenas com o fator $n^{-\frac{1}{2}}$, sendo n a quantidade de variáveis aleatórias sorteadas que constitui o próprio trabalho computacional do método, de forma que é muito difícil conseguir uma precisão além de quatro ou cinco algarismos significativos. Não importa se o algoritmo é direto ou “*importance sampling*”, este é um problema incontornável, pois deve-se ao teorema central do limite.

Quando escolhermos a distribuição de probabilidades usada para sortear os números aleatórios do cálculo de Monte Carlo igual à distribuição de probabilidades contida na formulação de certos problemas (matematicamente) determinísticos é comum o algoritmo

ser chamado de *simulação de Monte Carlo*, ao invés de *cálculo de Monte Carlo*. Uma distribuição de probabilidades gerada pelo computador para avaliar a expressão 2.19 igual à distribuição de Gibbs estaria simulando o efeito das flutuações térmicas, existentes em um sistema físico real posto em contato com um reservatório de calor a temperatura constante, sobre determinado observável.

Entretanto, não podemos usar a distribuição de Gibbs diretamente para sortear estados do sistema devido ao grande número de graus de liberdade dos sistemas de interesse, mas este problema pode ser contornado pelo método de Monte Carlo introduzido por *Metropolis et al.* [1953], que utiliza as propriedades das cadeias de Markov para obter indiretamente estados aleatórios de determinada distribuição de probabilidades. Na próxima seção veremos como isto pode ser feito e qual o seu custo.

2.5 Cadeias de Markov

Uma cadeia de Markov é uma seqüência temporal de variáveis aleatórias na qual a probabilidade de uma saída depende apenas da probabilidade da saída imediatamente anterior a ela. Podemos ver a cadeia de Markov como sendo um passeio aleatório no espaço de fases Ω de certo sistema que contém um número finito de estados $\{x_i\}$. A cada intervalo de tempo Δt , que consideraremos unitário, o sistema faz uma transição entre dois pontos de Ω . Desta forma após n passos temos uma seqüência de variáveis aleatórias $x'_0, x'_1, x'_2, \dots, x'_\ell, \dots, x'_n$ percorridas em instantes sucessivos $t = 0, 1, 2, \dots, \ell, \dots, n$, que definem uma trajetória aleatória do sistema em Ω . Como dissemos, em cadeias markovianas cada ponto desta trajetória depende apenas do ponto imediatamente anterior, ou seja, um estado futuro $x'_{\ell+1}$ depende do estado presente x'_ℓ mas não do estado passado $x'_{\ell-1}$. Desta forma a probabilidade do sistema estar em um ponto x_j de Ω no instante ℓ , $P_\ell(x'_\ell = x_j)$ deve obedecer à relação:

$$P_\ell(x'_\ell = x_j) = \sum_i P_{\ell-1}(x'_{\ell-1} = x_i) \omega_{ij}, \quad (2.23)$$

onde a somatória se estende por todos os pontos x_i de Ω e ω_{ij} é a probabilidade de transição do estado x_i para o estado x_j no instante ℓ dado que o sistema se encontre no estado x_i no passo $\ell - 1$, ou seja, é a própria probabilidade condicional

$$\omega_{ij} = P(x'_\ell = x_j | x'_{\ell-1} = x_i). \quad (2.24)$$

No caso geral de *processos* markovianos as probabilidades de transição acima podem depender do tempo ($\omega_{ij} = \omega_{ij}(\ell)$), contudo trataremos apenas com *cadeias* de Markov nas quais estas probabilidades são estacionárias, ou seja, independentes do tempo. Naturalmente a soma das probabilidades de transição de um estado x_i para qualquer outro estado de Ω deve contemplar todas as possibilidades de movimento, logo as probabilidades de transição apresentam a propriedade

$$\sum_j \omega_{ij} = 1, \text{ para qualquer } i. \quad (2.25)$$

A relação 2.23 pode ser reescrita na forma matricial,

$$P_\ell = P_{\ell-1}\omega, \quad (2.26)$$

onde P_ℓ e $P_{\ell-1}$ são os vetores distribuição de probabilidade nos instantes ℓ e $\ell - 1$ representados pelas matrizes linha de elementos $\{P_\ell(x'_\ell = x_i)\}$ e $\{P_{\ell-1}(x'_{\ell-1} = x_i)\}$, respectivamente. ω é a matriz probabilidade de transição de elementos $\{\omega_{ij}\}$.

A relação de recorrência 2.26 pode ser utilizada sucessivamente a partir do vetor distribuição de probabilidade inicial $P_0 = \{P_0(x'_0 = x_i)\}$ até se obter a distribuição de probabilidade da cadeia de Markov em um instante arbitrário ℓ ,

$$P_\ell = P_0\omega^\ell, \quad (2.27)$$

onde ω^ℓ é a ℓ -ésima potência da matriz ω . De acordo com 2.27, seu elemento ω_{ij}^ℓ é a pro-

babilidade de se atingir o estado x_j a partir do estado x_i em ℓ passos, portanto a cadeia de Markov é completamente caracterizada pelas propriedades da matriz probabilidade de transição e do vetor distribuição de probabilidade inicial.

Uma cadeia de Markov é chamada *irredutível* se a probabilidade de ir de x_i a x_j , dois estados quaisquer de Ω , não for nula. Neste caso é possível encontrar alguma potência de ω tal que o elemento $\omega_{ij}^\ell > 0$. Se para algum ℓ todos os elementos da potência ω^ℓ forem positivos dizemos que a matriz é *regular*. Neste caso, não importa o estado inicial, após um número suficientemente grande de passos o sistema tem probabilidade não nula de estar em qualquer ponto de Ω . Nas cadeias de Markov irredutíveis *cíclicas* os estados de Ω são subdivididos em d subconjuntos que são percorridos sempre na mesma ordem. O número inteiro d , o período da cadeia, é igual ao número de passos necessários para sair de determinado estado e a ele retornar. Nas cadeias cíclicas todas as potências de ω possuem elementos nulos, diferentes potências de ω apresentam zeros em diferentes posições que trocam de posições ciclicamente. O período d da cadeia é o maior divisor comum do conjunto de números inteiros $\{\ell_i\}$ tais que $\omega_{ii}^{\ell_i} > 0$. Portanto uma cadeia regular de Markov possui o período $d = 1$, ou seja, é aperiódica.

Uma cadeia irredutível de Markov de período d apresenta as seguintes propriedades [Kemeny and Snell, 1969]:

1. Existe um único vetor probabilidade estacionária P , de componentes $p_i = P(x' = x_i)$, tal que

$$P = P\omega, \quad p_i = \sum_j p_j \omega_{ji}. \quad (2.28)$$

2. Não importa o vetor distribuição de probabilidade inicial P_0 , o processo markoviano se aproxima¹ do vetor probabilidade estacionária P à medida que a seqüência tende ao infinito,

$$P = P_0 \left(\frac{1}{d} \sum_{l=0}^{d-1} \omega^{n+l} \right), \quad n \rightarrow \infty. \quad (2.29)$$

¹Para $d \neq 1$ não podemos considerar um estado da cadeia de Markov individualmente mas sim grupos de d estados consecutivos. ω^ℓ possui d seqüências convergentes, uma para cada classe cíclica, sua média $\frac{1}{d} \sum_{l=0}^{d-1} \omega^{n+l}$ converge para uma matriz cujas linhas são todas iguais ao vetor probabilidade estacionária.

3. A Lei dos Grandes Números se aplica para a distribuição de probabilidades estacionária $P = \{p_i = P(x' = x_i)\}$. Suas componentes p_i representam a fração de tempo, computado em múltiplos de d , na qual a cadeia de Markov pode ser encontrada no estado x_i .

Para o cálculo de Monte Carlo “*importance sampling*” precisamos que os pontos do espaço de fases sejam gerados aleatoriamente de acordo com uma determinada distribuição de probabilidades. De acordo com as propriedades acima, vemos que basta construir uma cadeia de Markov irredutível, ou seja, definir as probabilidades de transição, cuja probabilidade estacionária seja a que necessitamos. Desta forma não importa a configuração inicial, após um número suficiente de passos o sistema percorrerá os estados de Ω de acordo com a distribuição especificada. Uma condição suficiente para construir cadeias de Markov que possuam como distribuição de equilíbrio uma determinada distribuição de probabilidades é a imposição do princípio do balanceamento detalhado² [*Binder and Heermann, 1988*]

$$p_i \omega_{ij} = p_j \omega_{ji}. \quad (2.30)$$

A condição de balanço detalhado impõe a reversibilidade microscópica. Usando 2.25 para reescrever a equação de equilíbrio 2.28

$$\sum_j \{p_j \omega_{ji} - p_i \omega_{ij}\} = 0, \quad (2.31)$$

vemos que o balanceamento detalhado impõe que cada termo da somatória acima se anule separadamente, desta forma a probabilidade de ocorrer a transição x_i a x_j no equilíbrio é a mesma de ocorrer a transição inversa x_j a x_i .

Usando o balanceamento detalhado 2.30 vemos claramente que não é necessário conhecer explicitamente a distribuição de probabilidades estacionárias para se definir as

²Desde que a cadeia de Markov assim construída seja *irredutível*, ou seja, é preciso garantir ainda que todos os estados do sistema sejam percorridos independentemente do ponto de partida.

probabilidades de transição da cadeia de Markov, mas apenas suas razões

$$\frac{\omega_{ij}}{\omega_{ji}} = \frac{p_j}{p_i}. \quad (2.32)$$

A solução para ω_{ij} contudo não é única, o algoritmo de Metropolis usado para gerar estados aleatórios de acordo com a distribuição de Gibbs 2.17 define as probabilidades de transição como sendo proporcionais a

$$\min \{ \exp[-\beta \Delta \mathcal{H}_N], 1 \} \quad (2.33)$$

onde ΔH_N é a diferença de energia entre os estados x_j e x_i do sistema, $\Delta \mathcal{H}_N = \mathcal{H}_N(x_j) - \mathcal{H}_N(x_i)$. Outra possibilidade para se obter uma distribuição de equilíbrio de Gibbs é dada pelo algoritmo de Glauber que define as probabilidades de transição proporcionais a

$$\frac{1}{2} [1 - \tanh(\frac{\beta \Delta \mathcal{H}_N}{2})]. \quad (2.34)$$

A dificuldade na definição das probabilidades de transição, de acordo com os exemplos acima, depende da forma como é calculada a diferença de energia entre os estados x_i e x_j .

2.6 Simulações de Monte Carlo em Mecânica Estatística

Sistemas de mecânica estatística se caracterizam pelo grande número de constituintes. A implementação de uma cadeia de Markov no espaço de fases destes sistemas é virtualmente impossível se considerarmos a possibilidade de todos seus pontos estarem ligados em um único passo. Portanto devemos fazer severas restrições sobre os estados do sistema acessíveis a cada evolução do sistema.

O modo mais simples de se implementar a cadeia de Markov em um sistema de N

partículas consiste em gerar os estados da cadeia a partir do estado da cadeia anterior, mas modificando apenas o estado de um de seus constituintes de cada vez. Se o elemento do sistema a ter seu estado alterado for escolhido aleatoriamente, as probabilidades de transição 2.33 e 2.34 serão dadas respectivamente por

$$\omega_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{N} \exp[-\beta\delta\mathcal{H}_N], & \delta\mathcal{H}_N > 0 \text{ e } x_i \neq x_j \text{ pelo estado de até um elemento,} \\ \frac{1}{N}, & \delta\mathcal{H}_N \leq 0 \text{ e } x_i \neq x_j \text{ pelo estado de até um elemento,} \\ 0, & x_i \neq x_j \text{ pelos estados de mais de um elemento,} \end{cases} \quad (2.35)$$

e

$$\omega_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{2N} [1 - \tanh(\frac{\beta\delta\mathcal{H}_N}{2})], & x_i \neq x_j \text{ pelo estado de até um elemento,} \\ 0, & x_i \neq x_j \text{ pelos estados de mais de um elemento.} \end{cases} \quad (2.36)$$

Nas expressões acima o coeficiente $\frac{1}{N}$, deve-se ao fato de sortearmos com distribuição uniforme um dos N elementos do sistema a ter seu estado alterado. Estas probabilidades de transição permitem que o sistema percorra todo o espaço de fases do sistema, porém através de uma evolução que realiza pequenas modificações microscópicas do sistema. A diferença de energia entre estes dois micro-estados $\delta\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_N(x_j) - \mathcal{H}_N(x_i)$ é, em geral, facilmente calculada, pois a hamiltoniana do sistema contém apenas termos de interação locais.

2.7 Precisão das Estimativas de Monte Carlo

A estimativa de Monte Carlo de um observável macroscópico $A(x)$ 2.22 pode ser feita diretamente sobre uma amostragem de números aleatórios $\{A(x'_\ell)\}$ gerada pela cadeia de Markov. Usando o princípio do balanceamento detalhado, em nenhum momento precisamos usar explicitamente a distribuição de probabilidades estacionária. Contudo, como cada estado da cadeia de Markov é gerado a partir de seu estado anterior, os micro-estados x'_ℓ e $x'_{\ell+1}$ são parecidos e a amostragem produzida pela cadeia de Markov

é correlacionada. Este fato traz o problema da avaliação da precisão da estimativa de Monte Carlo pois a expressão 2.10 só é válida para variáveis aleatórias estatisticamente independentes.

Como dois micro-estados consecutivos de um sistema de N partículas gerados pela cadeia de Markov diferem entre si pelo estado de um único elemento, se espera que a correlação temporal entre as medidas de Monte Carlo seja da ordem de N . Este é o tempo mínimo necessário para se gerar uma configuração macroscopicamente diferente, pois todos os elementos do sistema teriam a oportunidade de modificar seus estados. Este tempo, normalmente chamado *passo de Monte Carlo* (PMC = uma tentativa de mudança de estado por elemento do sistema), é usado como intervalo de tempo no qual as configurações geradas pela cadeia de Markov são efetivamente aproveitadas para a análise numérica, sendo que os micro-estados intermediários devem ser descartados, ou seja, servem somente para a evolução do sistema.

Contudo, dependendo tanto do sistema quanto do algoritmo o tempo de decorrelação entre os estados gerados poderá exceder de muitas vezes um PMC. Particularmente podemos observar a memória do sistema através de uma análise gráfica da evolução temporal dos valores de determinado observável a partir de seu valor no estado inicial. Como este, em geral, não é um estado muito provável da distribuição de equilíbrio, seu valor é bastante diferente do valor das configurações que são observadas após um tempo suficientemente longo. Para evitar erros sistemáticos durante as estimativas de Monte Carlo é conveniente descartar as configurações iniciais necessárias para a cadeia atingir o equilíbrio, considerando o estado inicial (efetivo) da cadeia como sendo um dos seus estados típicos de equilíbrio. Entretanto, este cuidado não é suficiente uma vez que a correlação entre as variáveis aleatórias é intrínseca à amostragem produzida pela cadeia de Markov. A precisão das estimativas de Monte Carlo será sempre afetada pelo grau de correlação entre as variáveis aleatórias.

Um meio teórico de avaliar o efeito da correlação temporal entre amostragens feitas sobre uma cadeia de Markov é dado através da interpretação dinâmica deste processo

[*Binder and Heermann, 1988*], na qual se introduz a função normalizada de autocorrelação da grandeza $A(x)$

$$C_A(t) = \frac{\langle A'_0 A'_t \rangle - \langle A' \rangle^2}{\langle A'^2 \rangle - \langle A' \rangle^2}, \quad (2.37)$$

onde $A'_t = A(x'_t)$ é a variável aleatória gerada no instante $t = \ell \Delta t$, ℓ é o índice que numera a seqüência gerada pela cadeia de Markov a partir de um estado típico de equilíbrio e Δt é o intervalo de tempo entre uma transição e outra. O símbolo $\langle \dots \rangle$ indica a estimativa de Monte Carlo 2.22. Claramente $C_A(0) = 1$, e aproxima-se de zero à medida que $t \rightarrow \infty$, pois neste caso as variáveis são descorrelacionadas, $\langle A'_0 A'_t \rangle \rightarrow \langle A' \rangle^2$. Definimos o tempo de relaxação do observável A

$$\tau_A = \int_0^\infty C_A(t) dt \quad (2.38)$$

Admitindo que a autocorrelação decaia na forma $C_A(t) \propto \exp(-t/\tau_A)$ vemos que a autocorrelação de A é desprezível para intervalos de tempos maiores que o tempo de relaxação $t > \tau_A$. Pode-se demonstrar [*Binder and Heermann, 1988*] que a avaliação do erro estatístico das estimativas de Monte Carlo obtidas através da cadeia de Markov é dado por

$$\delta_A^2 = \left(2 \frac{\tau_A}{\Delta t}\right) \frac{\sigma_{A'}^2}{n}, \quad (2.39)$$

onde $\sigma_{A'}^2$ é a estimativa da variância das variáveis aleatórias A' 2.9, e n é o número de amostras. Esta expressão comparada com a estimativa do desvio de variáveis aleatórias independentes 2.10, mostra que ao usarmos variáveis aleatórias correlacionadas devemos aumentar o erro estatístico pelo fator $(2 \frac{\tau_A}{\Delta t})$. Note que esta expressão é na verdade independente do intervalo de tempo Δt com que é feita a amostragem pois é o tempo de observação $\tau_o = n \Delta t$ que de fato importa. Se aumentamos o tempo Δt em que são computadas as variáveis aleatórias A' diminuímos na mesma proporção a sua quantidade n .

O tempo de relaxação τ_A é de longe a grandeza mais difícil de se estimar em uma cadeia de Markov pois é preciso armazenar estados gerados em diferentes instantes para o cálculo de várias médias do tipo $\langle A'_0 A'_t \rangle$ contidas implicitamente em 2.38. Todas as

demais médias de Monte Carlo aqui descritas são calculadas simplesmente acumulando-se variáveis aleatórias de um mesmo instante, ou seja, o número aleatório gerado é imediatamente aproveitado podendo ser descartado em seguida. Um modo empírico [Binder, 1986] de avaliar o erro estatístico das estimativas de Monte Carlo consiste em calcular a variância 2.9 para diferentes conjuntos de variáveis aleatórias $\{A'\}_m$ obtidas pela mesma cadeia de Markov mas que têm a amostragem de seus elementos feitas somente a intervalos de tempo $\Delta t_m = m\Delta t$, onde naturalmente m é um número inteiro. Se observarmos que as variâncias $\sigma_{\{A'\}_m}^2$ são independentes de m podemos estimar o erro estatístico da maneira usual 2.10, sobre o conjunto $\{A'\}_m$, pois a amostragem já está efetivamente decorrelacionada, $\Delta t_m \gg \tau_A$.

Capítulo 3

O Método

Neste capítulo apresentaremos um novo método de Monte Carlo para o cálculo do maior autovalor de uma matriz de elementos não negativos. Como veremos, esta exigência é fundamental para a construção de nosso algoritmo probabilístico que pode ser visto como uma consequência do teorema de Perron-Frobenius [*Gantmacher*, 1960].

O ponto de partida do método consiste em relacionar os elementos da matriz a ser estudada às variáveis de estado de determinado sub-sistema. O sistema total será formado por cópias deste sub-sistema original arranjadas em uma seqüência linear, ou seja, semelhante a um colar de contas. Cada cópia do sub-sistema, ou conta deste colar, pode estar em um estado diferente. Cada elemento desta construção será então uma camada de um sistema composto de K camadas cada qual em um estado distinto σ_k . Os estados de duas camadas vizinhas definirão os elementos da matriz T .

Um exemplo familiar deste tipo de construção é utilizado em sistemas de spins clássicos quando abordados pela técnica da matriz de transferência. Nesta abordagem, um sistema de N sítios deve ser dividido em K camadas sucessivas, cada uma contendo N spins ($N = K \times N$). A hamiltoniana do sistema também deve ser escrita como a soma de hamiltonianas “entre camadas”, ou seja,

$$\mathcal{H} = \sum_k \mathcal{H}_{k,k+1}. \quad (3.1)$$

$\mathcal{H}_{k,k+1}$ contém os termos de interação da hamiltoniana \mathcal{H} internas à k e $k+1$, bem como as interações entre estas duas camadas. Os elementos da matriz de transferência T são definidos por:

$$T(\sigma_k, \sigma_{k+1}) = \exp(-\beta\mathcal{H}_{k,k+1}), \quad (3.2)$$

onde σ_k indica o estado da camada k , isto é, se refere aos estados dos N spins internos à camada k , portanto pode assumir 2^N valores, uma vez que cada sítio pode se apresentar em apenas dois estados. No caso específico do modelo de Ising na rede quadrada (Figura 3-1) o estado do sítio (i, k) é dado pela variável de Ising $\sigma_{i,k} = \pm 1$ e o estado da camada k pelo conjunto $\sigma_k = \{\sigma_{i,k}\}$.

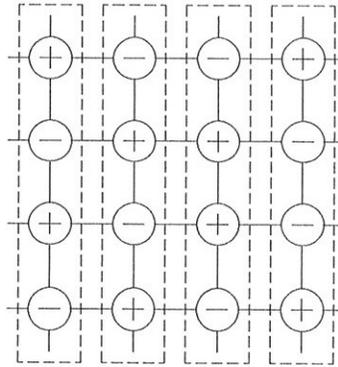


Figura 3-1: A matriz de transferência de um sistema de spins de Ising $T(\sigma_k, \sigma_{k+1}) = \exp(-\beta\mathcal{H}_{k,k+1})$ é definida a partir dos estados de duas camadas consecutivas, que destacamos acima em linhas pontilhadas.

É fácil verificar, através de 3.1 e 3.2, que a função de partição de sistemas 2.18 para spins clássicos pode ser escrita como o traço do produto das matrizes de transferência, se condições periódicas de contorno entre a primeira e a última camada forem adotadas, ou seja:

$$Z \equiv \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_K} \exp(-\beta\mathcal{H}) = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_K} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_K, \sigma_1) \quad (3.3)$$

Como veremos no próximo capítulo, a estimativa da função de partição do sistema clássico, e portanto a solução do problema, se traduz no cálculo do maior autovalor da matriz de transferência.

Em sistemas quânticos a utilidade de um método capaz de estimar o autovalor dominante de uma matriz não é a mesma que para sistemas clássicos, pois não mais buscamos a função de partição do sistema, mas sim as propriedades de seu estado fundamental. Apesar de objetivos distintos o método apresenta apenas ligeiras diferenças quanto ao processo de implementação.

Em sistemas quânticos os elementos de matriz são definidos por

$$T(\sigma_k, \sigma_{k+1}) = \langle \sigma_k | \mathcal{T} | \sigma_{k+1} \rangle, \quad (3.4)$$

onde \mathcal{T} é um operador quântico que atua entre as camadas k , correspondente ao “bra” $\langle \sigma_k |$, e a camada $k + 1$ dada pelo “ket” $|\sigma_{k+1}\rangle$. Como um operador quântico atua no sistema físico como um todo, o processo de construção de camadas precisa criar uma dimensão extra no sistema. Ao longo desta dimensão adicional são dispostas cópias do sistema original, cada qual em seu próprio estado (Figura 3-2).

Ao contrário de sistemas clássicos, os elementos de uma camada não interagem com os de outra, existem simplesmente para definir 3.4. Outra diferença em relação a cálculos sobre matrizes de transferência é que os elementos de matrizes de operadores quânticos não são necessariamente grandezas positivas, portanto este método tem aplicação restrita em sistemas quânticos.

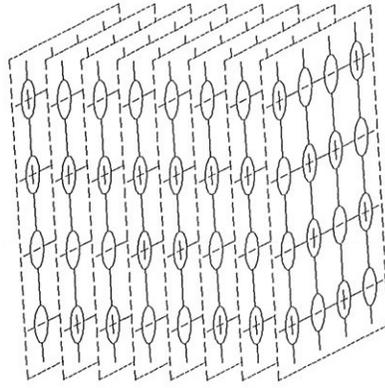


Figura 3-2: Os elementos de matriz $T(\sigma_k, \sigma_{k+1}) = \langle \sigma_k | T | \sigma_{k+1} \rangle$ para a simulação de um sistema de spin $-1/2$ quântico bidimensional são definidos a partir dos estados, σ_k e σ_{k+1} , de dois planos consecutivos do arranjo ilustrado. Logo, é necessário acrescentar uma dimensão extra ao sistema físico real.

Qualquer que seja o sistema, clássico ou quântico, uma vez que a matriz T tem apenas elementos não negativos podemos definir a probabilidade, $P(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_K)$, de encontrarmos as camadas $1, 2, \dots, K$ respectivamente nos estados $\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_K\}$ de acordo com a expressão:

$$P(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_K) = Z^{-1} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_K, \sigma_1) \quad (3.5)$$

onde Z , agora deve ser considerada, de forma geral, como a normalização:

$$Z = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_K} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_K, \sigma_1) = \sum_{\sigma_1} T^K(\sigma_1, \sigma_1) \quad (3.6)$$

Em sistemas de spins clássicos, esta definição de probabilidade corresponde à própria distribuição de probabilidades de Gibbs largamente utilizada em cálculos de Monte Carlo em mecânica estatística. Contudo para uma matriz T qualquer, de elementos positivos, esta probabilidade pode não ter necessariamente um significado físico, ainda assim ela poderá ser obtida pelas mesmas técnicas de simulação computacionais, discutidas no capítulo anterior.

Na verdade, é o fato da probabilidade 3.5 ser fatorável que torna o algoritmo possível, pois podemos construir uma cadeia de Markov cuja micro-evolução ocorra apenas entre estados do sistema diferentes por uma única camada. De acordo com o princípio do balanceamento detalhado 2.32, as probabilidades de transição serão facilmente definidas a partir dos elementos da matriz T ,

$$\frac{\omega_{\sigma_k \rightarrow \tilde{\sigma}_k}}{\omega_{\tilde{\sigma}_k \rightarrow \sigma_k}} = \frac{T(\sigma_{k-1}, \tilde{\sigma}_k)T(\tilde{\sigma}_k, \sigma_{k+1})}{T(\sigma_{k-1}, \sigma_k)T(\sigma_k, \sigma_{k+1})}, \quad (3.7)$$

onde $\omega_{\sigma_k \rightarrow \tilde{\sigma}_k}$ é a probabilidade de transição da camada k do sistema do estado σ_k para o estado $\tilde{\sigma}_k$. Usando estas probabilidades de transição podemos escrever um programa de computador para gerar configurações do sistema com a probabilidade desejada 3.5, de forma que médias do tipo 2.22 sejam diretamente calculadas.

Até agora apenas relacionamos os elementos da matriz T com uma probabilidade passível de ser simulada. Nosso objetivo até o final deste capítulo consiste em mostrar a relação entre as médias de Monte Carlo que podemos executar em um computador com o autovalor dominante da matriz T .

Sejam λ_j os autovalores e $\phi_j(\sigma_1)$ os respectivos autovetores normalizados de T , isto, é satisfazem a auto-equação [Gantmacher, 1960],

$$\sum_{\sigma_2} T(\sigma_1, \sigma_2) \phi_j(\sigma_2) = \lambda_j \phi_j(\sigma_1), \quad (3.8)$$

e a normalização,

$$\sum_{\{\sigma_1\}} \phi_i(\sigma_1) \phi_j^*(\sigma_1) = \delta_{ij}, \quad \sum_j \phi_j(\sigma_1) \phi_j^*(\sigma_2) = \delta_{\sigma_1 \sigma_2}. \quad (3.9)$$

Um desenvolvimento imediato destas equações é o teorema espectral que escreve a potência K da matriz T na forma

$$T^K(\sigma_1, \sigma_2) = \sum_j \phi_j(\sigma_1) \lambda_j^K \phi_j^*(\sigma_2), \quad (3.10)$$

que pode ser usada em 3.6 para reescrever a normalização

$$Z = \sum_j \lambda_j^K \quad (3.11)$$

Como mencionamos no início do capítulo, nosso método pode ser visto como uma consequência do teorema de Perron-Frobenius [Gantmacher, 1960], aplicável a qualquer matriz de elementos não negativos, irredutível e aperiódica, que estabelece:

1. O autovetor ϕ_0 correspondente ao maior autovalor λ_0 é não degenerado.
2. Qualquer outro autovalor de T satisfaz $|\lambda_j| \leq \lambda_0$.
3. O autovetor ϕ_0 possui todas as suas componentes positivas, $\phi_0(\sigma_1) \geq 0$ para qualquer estado σ_1 .

Extraindo o maior autovalor de T da somatória em 3.11 temos,

$$Z = \lambda_0^K \left[1 + \sum_{j \neq 0} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0} \right)^K \right]. \quad (3.12)$$

Agora podemos usar a propriedade 2 do teorema de Perron-Frobenius para obter Z no limite de muitas camadas. Neste caso, está claro que os termos dentro da somatória se anulam, ou seja, a função Z é dominada pelo maior autovalor de T,

$$Z \sim \lambda_0^K \quad \text{se} \quad K \rightarrow \infty. \quad (3.13)$$

A probabilidade marginal da camada 1 estar na configuração σ_1 é obtida através de 3.5 somando-se sobre as configurações de todas as camadas exceto as da primeira, ou seja,

$$P(\sigma_1) = \sum_{\sigma_2} \sum_{\sigma_3} \dots \sum_{\sigma_K} P(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_K) = \frac{1}{Z} T^K(\sigma_1, \sigma_1). \quad (3.14)$$

Usando novamente o teorema espectral e pondo em evidência o maior autovalor temos,

$$P(\sigma_1) = \frac{\phi_0^*(\sigma_1)\phi_0(\sigma_1) + \sum_{j \neq 0} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0}\right)^K \phi_j^*(\sigma_1)\phi_j(\sigma_1)}{1 + \sum_{j \neq 0} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0}\right)^K}. \quad (3.15)$$

Em sistemas de muitas camadas, limite $K \rightarrow \infty$, relacionamos a “probabilidade de uma camada” com o norma ao quadrado do autovetor dominante,

$$P(\sigma_1) = [\phi_0(\sigma_1)]^2. \quad (3.16)$$

Correções a esta expressão são naturalmente da ordem de $(\lambda_1/\lambda_0)^K$ onde λ_1 é o segundo maior autovalor.

A probabilidade de duas camadas vizinhas, 1 e 2, estarem respectivamente nos estados σ_1 e σ_2 é obtida agora somando-se na expressão 3.5 sobre os estados de todas as demais camadas,

$$P(\sigma_1, \sigma_2) = \sum_{\sigma_3} \sum_{\sigma_4} \dots \sum_{\sigma_K} P(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \dots, \sigma_K). \quad (3.17)$$

Desenvolvendo esta expressão de forma análoga à “probabilidade de uma camada” termos,

$$P(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{T(\sigma_1, \sigma_2) \{ \phi_0^*(\sigma_2)\phi_0(\sigma_1) + \sum_{j \neq 0} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0}\right)^{K-1} \phi_j^*(\sigma_2)\phi_j(\sigma_1) \}}{\lambda_0 \{ 1 + \sum_{j \neq 0} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_0}\right)^{K-1} \}} \quad (3.18)$$

Considerando novamente o limite de muitas camadas, obtemos finalmente a probabilidade de “duas camadas”

$$P(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\lambda_0} T(\sigma_1, \sigma_2) \phi_0(\sigma_2) \phi_0(\sigma_1), \quad (3.19)$$

onde as correções a esta expressão são da ordem de $(\lambda_1/\lambda_0)^K$.

As fórmulas 3.16 e 3.19 estabelecem a conexão entre as médias de Monte Carlo vistas no capítulo anterior e o maior autovalor de T. Devemos lembrar que o lado esquerdo destas equações é “resolvido” pela simulação de Monte Carlo executada no computador, ou seja, a máquina gera aleatoriamente configurações de “uma camada” σ'_1 com uma

distribuição de probabilidade $P(\sigma_1)$ e também configurações de “duas camadas” $\sigma'_1\sigma'_2$ com distribuição de probabilidades $P(\sigma_1, \sigma_2)$. Por exemplo, o histograma dos estados de “uma camada” σ'_1 gerados durante a simulação de Monte Carlo é uma estimativa numérica de $P(\sigma_1)$, e devido a 3.16 também é uma estimativa do quadrado das componentes do autovetor dominante de T. Este é um exemplo apenas ilustrativo do processo, pois em sistemas grandes o número de estados acessíveis a cada camada torna inviável este procedimento na prática.

Para determinar o maior autovalor de T devemos considerar na equação 3.19 a possibilidade de duas camadas vizinhas estarem no mesmo estado $\sigma_1 = \sigma_2$,

$$P(\sigma_1, \sigma_2)\delta_{\sigma_1\sigma_2} = \frac{1}{\lambda_0}T(\sigma_1, \sigma_1)P(\sigma_1), \quad (3.20)$$

onde usamos 3.16 no lado direito desta expressão para substituir $\phi_0(\sigma_1)\phi_0(\sigma_1)$ e introduzimos a função delta

$$\delta_{\sigma_1\sigma_2} = \begin{cases} 1 & \text{se } \sigma_1 = \sigma_2, \\ 0 & \text{se } \sigma_1 \neq \sigma_2, \end{cases} \quad (3.21)$$

para identificar as formas gerais 2.20 das duas médias

$$\langle T(\sigma_1, \sigma_1) \rangle_0 = \sum_{\sigma_1} T(\sigma_1, \sigma_1)P(\sigma_1) \quad (3.22)$$

e

$$\langle \delta_{\sigma_1\sigma_1} \rangle_0 = \sum_{\sigma_1\sigma_2} \delta_{\sigma_1\sigma_2}P(\sigma_1, \sigma_2). \quad (3.23)$$

Se considerarmos a soma sobre todos os estados na expressão 3.20, podemos relacionar λ_0 a estas médias

$$\langle \delta_{\sigma_1\sigma_1} \rangle_0 = \frac{1}{\lambda_0} \langle T(\sigma_1, \sigma_1) \rangle_0 \quad (3.24)$$

A média 3.22 pode ser estimada pela simulação de Monte Carlo acumulando-se os números aleatórios $T(\sigma'_1, \sigma'_1)$, ou seja, o elemento diagonal de T correspondente ao estado aleatório

σ'_1 , portanto é uma função de “uma camada” do sistema,

$$\langle T(\sigma_1, \sigma_1) \rangle = \frac{1}{N_{PMC}} \sum_{i=1}^{N_{PMC}} T(\sigma'_i, \sigma'_i). \quad (3.25)$$

Agora o índice i indica os estados gerados ao longo da simulação. A amostragem de $T(\sigma'_i, \sigma'_i)$ é feita a cada passo de Monte Carlo (PMC), conforme visto na seção 2.7, e possui N_{PMC} elementos.

A média 3.23 pode ser estimada pela freqüência com que duas camadas vizinhas são encontradas no mesmo estado,

$$\langle \delta_{\sigma_1 \sigma_1} \rangle = \frac{1}{N_{PMC}} \sum_{i=1}^{N_{PMC}} \delta_{\sigma'_i \sigma'_i}. \quad (3.26)$$

Finalmente, o maior autovalor da matriz T , pode ser estimado pela razão entre estas duas médias de Monte Carlo,

$$\lambda_0 = \frac{\langle T(\sigma_1, \sigma_1) \rangle}{\langle \delta_{\sigma_1 \sigma_1} \rangle}. \quad (3.27)$$

Em sistemas quânticos, o método também pode ser usado para calcular o valor esperado do operador \mathcal{O} no auto-estado dominante do operador \mathcal{T} usado na definição 3.4, desde que ele seja diagonal na representação $|\sigma_1\rangle$, ou seja

$$\mathcal{O} |\sigma_1\rangle = f_{\mathcal{O}}(\sigma_1) |\sigma_1\rangle, \quad (3.28)$$

onde $f_{\mathcal{O}}(\sigma_k)$ é uma função escalar que depende dos estados de “uma camada” σ_1 . O valor esperado do operador \mathcal{O} no estado correspondente ao maior autovalor de \mathcal{T} é dado pela média quântica

$$\bar{\mathcal{O}} = \langle \phi_0 | \mathcal{O} | \phi_0 \rangle = \sum_{\sigma_1} f_{\mathcal{O}}(\sigma_1) \phi_0^*(\sigma_1) \phi_0(\sigma_1). \quad (3.29)$$

onde a última igualdade é possível graças à expressão 3.28. Usando a expressão 3.16,

podemos escrever a média quântica em termos da média estatística,

$$\bar{\mathcal{O}} = \langle f_{\mathcal{O}}(\sigma_1) \rangle_0 = \sum_{\sigma_1} f_{\mathcal{O}}(\sigma_1) P(\sigma_1) \quad (3.30)$$

que pode ser estimada durante a simulação de Monte Carlo por

$$\langle f_{\mathcal{O}}(\sigma_1) \rangle = \frac{1}{N_{PMC}} \sum_{i=1}^{N_{PMC}} f_{\mathcal{O}}(\sigma'_i) \quad (3.31)$$

Capítulo 4

Sistemas de Spins de Ising

4.1 Introdução

O modelo de Ising [*Thompson*, 1981] é o modelo mais simples capaz de representar as transições de fase existentes em sistemas físicos reais. Proposto inicialmente para descrever sistemas ferromagnéticos, este modelo pode ser considerado um paradigma para toda a mecânica estatística graças à solução de *Onsager* [1944] do sistema bidimensional. Em termos de soluções exatas, pouco se tem avançado desde então, somente para citar os casos mais simples, o modelo de Ising tridimensional e os casos antiferromagnéticos de mais de uma dimensão permanecem em aberto. Naturalmente, isto não quer dizer que pouco sabemos, sistemas de spins de Ising e suas variantes vêm sendo exaustivamente estudados por diversas técnicas analíticas e numéricas e formam o ambiente conhecido deste ramo da ciência. Poderíamos afirmar, como regra geral, que o desenvolvimento de uma nova técnica analítica ou computacional deve provar sua validade e utilidade em sistemas de spins de Ising. Neste capítulo submetemos nosso método a esta prova, porém, além de um simples teste, o apresentamos como um esquema útil para a estimativa *direta* da entropia ou da energia livre de Helmholtz de sistemas de spins clássicos através de simulações de Monte Carlo, grandezas estas normalmente de difícil acesso neste tipo de análise numérica.

Métodos de Monte Carlo usuais são capazes de estimar qualquer propriedade de um sistema que possa ser escrito na forma de uma média térmica do tipo 2.19. Por exemplo, a energia interna do sistema U é dada pela média da hamiltoniana \mathcal{H} ,

$$U = \langle \mathcal{H} \rangle. \quad (4.1)$$

Entretanto, existem grandezas que não podem ser escritas nesta forma, pelo menos não de forma simples. Este é o caso da energia livre de Helmholtz F do sistema ou de sua entropia S . Devemos lembrar que a função fundamental do sistema no “ensemble” canônico é a energia livre, ou seja, esta é a grandeza a partir da qual se obtém todas as propriedades termodinâmicas do sistema. O fato de não poder ser obtida diretamente em simulações usuais de Monte Carlo é certamente uma deficiência deste tipo de análise numérica. A determinação da entropia é um problema equivalente, pois uma vez calculada a energia interna por 4.1, as grandezas F e S devem satisfazer a relação termodinâmica

$$F = U - TS. \quad (4.2)$$

É possível usar métodos *indiretos* ou *de integração* [Binder, 1981], [Polgreen, 1984] para o cálculo destas grandezas, uma vez que as derivadas das funções termodinâmicas de estado são facilmente estimadas em simulações de Monte Carlo usuais. Por exemplo, através de estimativas do calor específico do sistema em várias temperaturas,

$$C(T) \equiv \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right) = \frac{1}{kT^2} (\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2), \quad (4.3)$$

pode-se determinar a diferença de entropia entre dois estados do sistema através da integração

$$\frac{S(T)}{k} - \frac{S(T_r)}{k} = \int_{T_r}^T \frac{C(T)}{T} dT. \quad (4.4)$$

Se a entropia do sistema a uma temperatura de referência T_r for conhecida, a entropia estará determinada. Geralmente, a entropia do sistema a altas temperaturas S_∞ é facil-

mente calculada, por exemplo, um sistema de N spins $-1/2$ localizados possui,

$$\frac{S_\infty}{N} = \frac{1}{N} \lim_{T \rightarrow \infty} [S(T, H, N)] = k \ln 2. \quad (4.5)$$

Claramente, métodos *indiretos* como este são inconvenientes pela necessidade de várias simulações de Monte Carlo, deste $T \rightarrow \infty$ até o ponto onde realmente se deseja conhecer a entropia, de forma que muitas simulações podem ser feitas fora da região de interesse. Além disso, se o sistema apresentar uma transição de fase durante este percurso poderá haver dificuldades neste método mesmo se estivermos interessados em pontos distantes da linha de mudança de fases. Se a transição for de primeira ordem, uma possível metaestabilidade dificultará o cálculo de integrais do tipo 4.4 (definidas sobre trajetórias reversíveis do diagrama de fases). Se estivermos nas vizinhanças de uma transição de segunda ordem, o problema será a divergência de grandezas como o calor específico.

A ineficiência intrínseca dos métodos indiretos estimulou o surgimento de uma nova classe de métodos de Monte Carlo. Os métodos *diretos* são capazes de calcular a energia livre ou a entropia do sistema através de uma única simulação que é realizada diretamente no ponto de interesse. Várias técnicas deste tipo têm surgido, basicamente podemos separá-las em dois grupos.

O primeiro conjunto de métodos *diretos* pode ser caracterizado por relacionar a entropia do sistema à frequência com que as suas configurações são geradas pela cadeia de Markov. *Ma* [1981] faz uma conexão entre as propriedades dinâmicas do sistema e a entropia. Seu argumento estabelece que, se a trajetória do sistema é conhecida, todas as suas propriedades estão determinadas e não somente aquelas escritas na forma de uma média temporal de alguma variável dinâmica, como é o caso da energia ou da pressão. Assim a entropia pode ser obtida contando-se o número de pontos coincidentes da trajetória do sistema pelo seu espaço de fases. O interesse deste método é de caráter mais teórico do que prático pois consegue relacionar as propriedades dinâmicas do sistema com a entropia, que não é uma grandeza definida em mecânica ou eletromagnetismo. Sua

implementação em sistemas grandes como um método computacional é bastante difícil devido à necessidade de armazenamento de todos os pontos da trajetória do sistema para sua posterior comparação.

Meirovitch [1977] propõe um método em que obtém uma aproximação para a entropia escrita em função das frequências com que certos estados locais do sistema são gerados pela simulação de Monte Carlo que é aplicado posteriormente a vários sistemas [*Meirovitch*, 1983], [*Meirovitch*, 1984]. Este método requer muito menos memória computacional que o método de *Ma* [1981], porém apresenta um certo grau de arbitrariedade na escolha dos estados locais que devem ser analisados.

Bichara et al. [1988] medem as frequências com que estados de determinada energia são gerados durante a simulação de Monte Carlo para obter a função densidade de estados $g_N(E)$ com a qual finalmente calcula a função de partição do sistema através da integral sobre os estados de energia do sistema $Z = \int g_N(E) \exp(-\beta E) dE$. Como a estimativa da função densidade de estados deste método requer simulações de Monte Carlo para diversos valores de temperatura, não acreditamos ser apropriado a reinvidicação de método *direto* para este caso, a menos que esta classificação apenas exclua os métodos de integração termodinâmicos.

O segundo grupo de métodos diretos baseia-se no *princípio da distribuição do potencial* (“potential distribution principle”) introduzido por *Widom* [1963]. Este princípio relaciona o potencial químico $\mu(T, V, N)$ do sistema à média canônica do fator de Boltzmann do potencial interatômico observado pela adição de uma partícula teste, $\langle \exp(-\beta \Delta E_a) \rangle$. Analogamente, *de Oliveira* [1982] mostra que a média canônica do fator de Boltzmann do potencial devido à remoção de uma partícula teste $\langle \exp(-\beta \Delta E_r) \rangle$ também pode ser usada. Métodos de Monte Carlo usando este princípio têm sido aplicados em sistemas fluidos [*Oates et al.*, 1990], [*Lim et al.*, 1990b], [*Lim et al.*, 1990a] nos quais as propriedades termodinâmicas de interesse não são obtidas diretamente por algoritmos usuais.

O método apresentado no capítulo anterior pode ser usado como um novo método

direto para a estimativa da energia livre ou da entropia de sistemas de spin através de simulações de Monte Carlo. Como os outros métodos diretos, este também possui a vantagem de ser executado apenas nos pontos de interesse do diagrama de fases. Este método, de certa forma, se relaciona com o primeiro grupo dos métodos diretos pois verifica a coincidência de estados entre duas camadas do sistema através do cálculo 3.26. Porém, ao contrário destes, apresenta a vantagem de ser realizado sobre algoritmos usuais de simulações de Monte Carlo no “ensemble” canônico necessitando apenas do acréscimo de duas médias térmicas, dadas por 3.25 e 3.26, de implementação bastante simples, portanto sem necessidade do uso intensivo de memória computacional.

4.2 O Algoritmo

Um sistema Ising é formado por uma rede cristalina em que cada sítio possui um spin que pode estar em apenas dois estados, para cima ou para baixo e são representados pelas variáveis de Ising $\sigma_{\vec{r}} = +1$ e $\sigma_{\vec{r}} = -1$, onde \vec{r} é um vetor da rede cristalina. A hamiltoniana do sistema de spins tem a forma

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \sum_{\vec{r}, \vec{v}} \sigma_{\vec{r}} \sigma_{\vec{r}+\vec{v}} - H \sum_{\vec{r}} \sigma_{\vec{r}}. \quad (4.6)$$

A soma em \vec{r} percorre todos os sítios da rede e \vec{v} indica uma soma sobre todos os seus primeiros vizinhos. J é o parâmetro de acoplamento entre os sítios e H é um campo magnético externo. Se $J < 0$ o sistema será ferromagnético, pois os estados de spin de sítios vizinhos tendem a se alinhar induzindo o ordenamento ferromagnético do sistema. No caso de $J > 0$, o sistema será antiferromagnético, pois o acoplamento favorece o ordenamento antiparalelo dos estados de spin de sítios vizinhos.

A energia livre de Helmholtz por sítio $f = \frac{1}{N}F$, e portanto a solução do problema,

é calculada através da função de partição Z dada na expressão 3.3 através de

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \ln(Z) \right]. \quad (4.7)$$

Dividindo o sistema em K camadas como em 3.1 podemos definir os elementos da matriz de transferência T de acordo com 3.2. Para tomar o limite termodinâmico da expressão acima escrevemos $N = K \times N$, onde N é o número de sítios contidos em cada uma das K camadas do sistema. No limite $K \rightarrow \infty$, vimos em 3.13, a função de partição do sistema é dominada pelo maior autovalor de T , de modo que a energia livre de Helmholtz por spin do sistema é dada por

$$f = -\frac{1}{\beta N} \ln(\lambda_0). \quad (4.8)$$

Finalmente, podemos usar o método de Monte Carlo apresentado no capítulo anterior, em particular a fórmula 3.27, para estimar o maior autovalor λ_0 da matriz de transferência que substituído na expressão acima fornecerá toda a informação termodinâmica do sistema. Também podemos usar 4.2 para estimar diretamente a entropia do sistema no ponto desejado do diagrama de fases do sistema.

A simulação de sistemas de spin é feita através do algoritmo de *Metropolis et al.* [1953], onde em cada passo se tenta inverter o estado de um único sítio do sistema, $\sigma_{\vec{r}} \rightarrow -\sigma_{\vec{r}}$, de acordo com uma probabilidade dada pela função de Glauber 2.34,

$$\omega_{\sigma_{\vec{r}} \rightarrow -\sigma_{\vec{r}}} = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{\beta \Delta \mathcal{H}}{2} \right) \right] = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(-\frac{\beta J \sigma_{\vec{r}} \sum_{\vec{v}} \sigma_{\vec{r}+\vec{v}}}{2} \right) \right]. \quad (4.9)$$

A escolha da dinâmica de Glauber se justifica para a simulação de sistemas antiferromagnéticos por estes apresentarem estados altamente degenerados. Nestes casos a função 4.9 apresenta uma maior simetria entre transições de estados de mesma energia ($\Delta \mathcal{H} = 0$) pois a probabilidade de mudança de estado é igual à probabilidade de nele permanecer, ao contrário da função de Metropolis 2.33 onde esta transição é sempre aceita.

Durante a simulação de Monte Carlo devemos calcular as médias 3.25 e 3.26 com as quais determinamos o maior autovalor de T de acordo com a fórmula 3.27. Vimos que a segunda média é estimada pela frequência com que duas camadas se apresentam no mesmo estado durante a simulação. Se imaginarmos um sistema antiferromagnético a baixas temperaturas, onde duas sub-redes se orientam em direções opostas, a probabilidade de encontrarmos duas camadas no mesmo estado será muito baixa, prejudicando a amostragem do método. Isto pode ser facilmente evitado se imaginarmos uma transformação sobre os estados de uma camada, $\sigma_k \rightarrow \tilde{\sigma}_k = \zeta(\sigma_k)$, que mantém o autovetor dominante $\phi_0(\sigma_k)$, e conseqüentemente a probabilidade $P(\sigma_k)$, invariante. A partir da equação 3.24 temos

$$P[\sigma_1, \zeta(\sigma_1)] = \frac{1}{\lambda_0} T[\sigma_1, \zeta(\sigma_1)] P(\sigma_1), \quad (4.10)$$

da qual obtemos as médias de Monte Carlo

$$\langle \delta_{\sigma_1, \zeta(\sigma_1)} \rangle = \frac{1}{\lambda_0} \langle T[\sigma_1, \zeta(\sigma_1)] \rangle. \quad (4.11)$$

A média $\langle \delta_{\sigma_1, \zeta(\sigma_1)} \rangle$ é estimada pela frequência com que duas camadas vizinhas são encontradas respectivamente nos estados σ_1 e $\zeta(\sigma_1)$. A média $\langle T[\sigma_1, \zeta(\sigma_1)] \rangle$ é calculada substituindo σ_1 e $\zeta(\sigma_1)$ em 3.25, portanto não é obtida a partir dos elementos diagonais da matriz T , mas continua sendo uma função de “uma camada”.

A cada transformação invariante corresponde uma equação 4.11, que pode ser usada para se estimar λ_0 . Uma transformação útil é dada pela imposição de condições periódicas de contorno no sistema, pois deixam as rotações ao longo delas invariantes. Assim podemos girar o sistema, de um ou mais parâmetros de rede, em cada direção em que as condições periódicas de contorno são adotadas. Por exemplo, no antiferromagneto de Ising na rede quadrada, cada camada é formada por uma coluna de spins (ver Figura 3-1) que contém N sítios, de forma que é possível executar N rotações que deixam o sistema invariante, e portanto usar N equações 4.11 para calcular λ_0 . O ordenamento antiferromagnético do sistema a baixa temperatura que prejudicava a amostragem de

$\langle \delta\sigma_1, \sigma_1 \rangle$ é compensado agora pela alta estatística no cálculo das médias $\langle \delta_{\sigma_1, \zeta(\sigma_1)} \rangle$, onde os estados $\zeta(\sigma_1)$ correspondem a um número ímpar de rotações do estado σ_1 .

Um outro problema que pode ser facilmente resolvido é dado pela saturação das variáveis numéricas usadas no cálculo da média 3.25 quando estudamos o sistema a baixas temperaturas. Neste caso, os elementos da matriz T coletados durante a simulação tendem ao infinito à medida que $\beta \rightarrow \infty$. Para evitar esta situação, basta definir a matriz T'

$$T' = \exp[\beta N u_0] T, \quad (4.12)$$

ou

$$T'(\sigma_l, \sigma_{l+1}) = \exp[-\beta(\mathcal{H}_{l,l+1} - N u_0)] \quad (4.13)$$

onde u_0 é a energia do estado fundamental por sítio do sistema. Como $\mathcal{H}_{l,l+1} - N u_0 > 0$ para todos os estados do sistema exceto o(s) estado(s) fundamental(ais) a matriz T' possui somente elementos finitos. Podemos usar o método para calcular seu maior autovalor λ'_0 que se relaciona diretamente com a entropia do sistema através de 4.2 e 4.8,

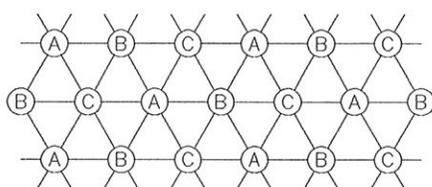
$$\frac{s}{k} = \frac{1}{N} \ln(\lambda'_0) + \beta(u - u_0). \quad (4.14)$$

Se o interesse for apenas a entropia residual, $T = 0$, a matriz T' terá apenas elementos nulos ou unitários e a simulação será ainda mais simples.

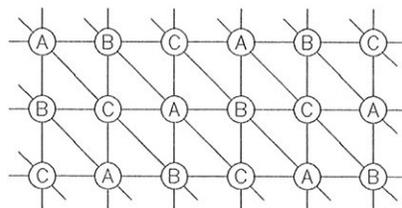
4.3 Antiferromagneto de Ising na Rede Triangular

O antiferromagneto de Ising na rede triangular com interações entre primeiros vizinhos é conhecido devido a seu estado fundamental altamente degenerado e por não apresentar transição de fase a campo nulo [Wannier, 1950]. Este alto grau de degenerescência é devido à frustração do sistema imposto pela geometria da rede. Na Figura 4-1, vemos que a rede triangular pode ser dividida em três sub-redes, denominadas pelas letras *A*, *B* e *C*.

Figura 4-1: Rede Triangular



(a) A rede triangular pode ser dividida em três sub-redes *A*, *B* e *C*. Sítios pertencentes a uma sub-rede só interagem com os sítios das outras duas.



(b) Uma rede quadrada com interações em uma de suas diagonais é equivalente à rede triangular e pode ser facilmente simulada em computadores.

A *frustração* de uma rede indica a impossibilidade que esta tem de satisfazer todas as suas ligações, isto é, que cada de ligação contribua com a menor energia possível. Em sistemas antiferromagnéticos a menor energia de cada par isoladamente ocorre quando seus spins se apresentam em estados opostos.

No sistema a campo nulo, vemos que se as ligações entre os sítios das sub-redes *A* e *B* estiverem satisfeitas, as ligações da sub-rede *C* com as sub-redes *A* e *B* jamais serão simultaneamente satisfeitas. Logo o número mínimo de degenerescência do estado fundamental a campo nulo deve ser $2^{\frac{1}{3}N}$, pois envolve a arbitrariedade que temos em fixar os estados dos $\frac{1}{3}N$ sítios de uma das sub-redes do sistema. Conseqüentemente o sistema tem entropia residual, isto é, a entropia a temperatura nula é diferente de zero.

Na presença de um campo magnético externo *H*, este sistema apresenta uma fase ferromagnética a baixa temperatura contanto que o campo não ultrapasse certo valor crítico

H_c . Esta fase corresponde ao ordenamento de duas sub-redes na direção do campo magnético externo, enquanto a terceira sub-rede procura satisfazer suas ligações antiferromagnéticas se orientando na direção oposta. A temperatura nula, esta situação produz uma magnetização líquida de $+\frac{1}{3}$ na direção do campo. Naturalmente, se a intensidade do campo superar o custo energético da frustração das ligações entre as três sub-redes todos os spins do sistema se orientarão ao longo do campo formando uma fase paramagnética. As fases ordenada ferrimagnética e a paramagnética são separadas por uma linha de transição de segunda ordem [Metcalf, 1973], [Schick et al., 1977], [Chin and Landau, 1987]. O estado fundamental do sistema a campo crítico $H = H_c = 6J$, também é altamente degenerado apresentando entropia residual [Baxter, 1980]. Nesta caso a energia do acoplamento da terceira sub-rede com o campo é exatamente igual à energia de seu ordenamento antiferromagnético com as outras duas sub-redes.

A hamiltoniana antiferromagnética de Ising 4.6 para a rede triangular, adotando condições periódicas de contorno, é dada por

$$\mathcal{H} = J \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^N [\sigma_{i,k}(\sigma_{i+1,k} + \sigma_{i,k+1} + \sigma_{i+1,k+1})] - H \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^N \sigma_{i,k}. \quad (4.15)$$

O índice k percorre as K camadas de spins que formam a rede, representadas por colunas na Figura 4-1, enquanto o índice i percorre os N spins dentro de cada camada (coluna). Definimos a hamiltoniana de acoplamento entre as camadas (colunas) k e $k+1$ como sendo a somatória interna da expressão acima,

$$\mathcal{H}_{k,k+1}(\sigma_k, \sigma_{k+1}) = J \sum_{i=1}^N [\sigma_{i,k}(\sigma_{i+1,k} + \sigma_{i,k+1} + \sigma_{i+1,k+1})] - H \sum_{i=1}^N \sigma_{i,k}. \quad (4.16)$$

Note que introduzimos as novas variáveis $\sigma_k = \{\sigma_{i,k}\}$ que definem o estado de cada camada, ou seja, indica as 2^N possibilidades dos estados dos sítios internos à camada k .

Os elementos da matriz de transferência 3.2 são dados por

$$T(\sigma_k, \sigma_{k+1}) = \exp \left\{ \sum_{i=1}^N [-\beta J \sigma_{i,k} (\sigma_{i+1,k} + \sigma_{i,k+1} + \sigma_{i+1,k+1})] + \beta H \sum_{i=1}^N \sigma_{i,k} \right\}. \quad (4.17)$$

4.3.1 Resultados

Simulamos o antiferromagneto de Ising em redes de $N \times K$ sítios usando o algoritmo usual de Glauber. Durante o processo estimamos as três médias térmicas 3.26, 3.25 e 4.1. As duas primeiras estimativas consistem no único acréscimo ao programa requerido pelo nosso método de Monte Carlo e são usadas para a determinação do autovalor dominante da matriz de transferência através da fórmula 3.27, e portando da energia livre do sistema 4.8. Para o cálculo destas médias usamos as transformações invariantes devido às condições periódicas de contorno 4.11, de modo que comparamos N possibilidades de camadas iguais. Finalmente, usamos a terceira média térmica, a energia interna do sistema, para estimar a entropia do sistema através da relação termodinâmica 4.2.

Usamos três diferentes tamanhos de rede $N \times K = 9 \times 81$, 18×81 , e 27×81 . Para cada uma fixamos um valor do campo magnético externo H com o qual realizamos simulações desde altas temperaturas até a temperatura nula. Repetimos este procedimento para os valores de campo $H = 0$, $H_c/2$ e H_c . Na Figura 4-2 apresentamos o gráfico da entropia por sítio s em função da temperatura com resultados obtidos nestas simulações.

As simulações geralmente foram realizadas com 10000 passos de Monte Carlo (PMC), onde cada passo significa uma tentativa de mudança de estado por sítio da rede, a partir de um estado sorteado ao acaso. Somente próximo a alguma transição de fases executamos simulações duas ou três vezes maiores.

Para os valores de campo $H = 0$ e $H = H_c = 6J$ não observamos transição de fases, sendo o sistema desordenado para todas as temperaturas. Como vemos no gráfico da Figura 4-2, estes casos apresentam entropia residual que estimamos em $s/k = 0,3229(4)$ para $H = 0$ e $s/k = 0,3333(1)$ para $H = 6J$. Estes valores devem ser respectivamente comparados aos resultados exatos de *Wannier* [1950,1973], $0,3230659\dots$, e *Baxter* [1980]

0,33327....

Ao longo de $H = 3J$, observamos na Figura 4-2 uma inflexão na curva da entropia o que indica uma transição de fase em torno da temperatura $kT/J = 1,35$. O resfriamento do sistema abaixo desta temperatura inicia o ordenamento ferrimagnético.

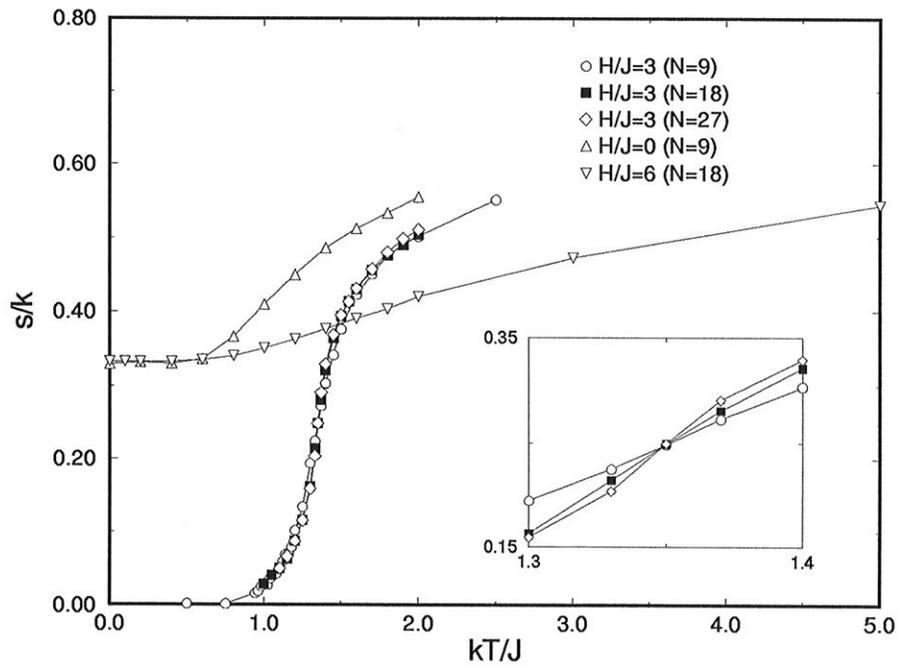
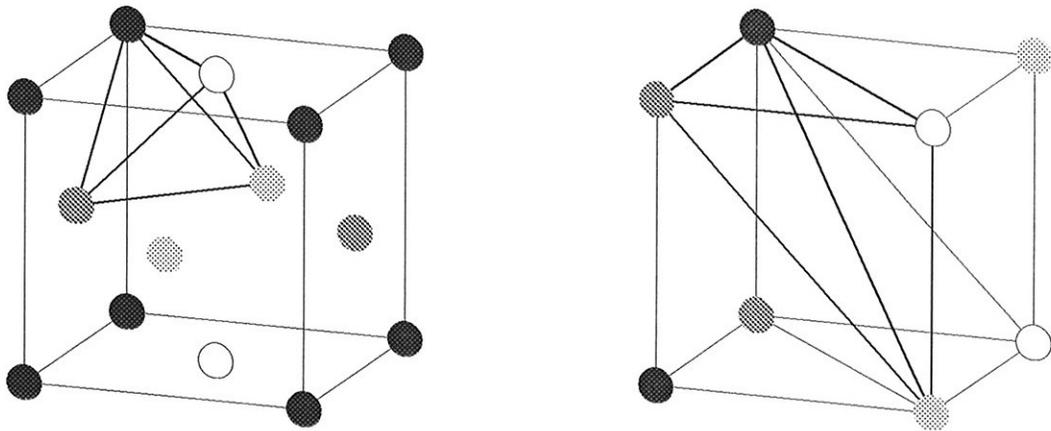


Figura 4-2: Entropia por sítio s em função da temperatura T para o modelo de Ising antiferromagnético na rede triangular para vários valores de campo externo H . Em destaque mostramos a entropia em função da temperatura para o caso $H = 3J$ em torno do ponto de transição.

4.4 Antiferromagneto de Ising na Rede FCC

O antiferromagneto de Ising na rede cúbica de face centrada (fcc) vem sendo intensivamente estudado, em parte, graças à sua relação com o ordenamento de ligas binárias com as de cobre-ouro. Como sabemos [Thompson, 1981], o modelo de Ising também descreve estes sistemas, neste caso, as variáveis de Ising $\sigma_{\vec{r}} = 1$ ou $\sigma_{\vec{r}} = -1$ correspondem ao tipo de átomo que ocupa o sítio \vec{r} , se do elemento X ou Y . Nas ligas $Cu - Au$, existe uma interação repulsiva entre os átomos da mesma espécie química de modo que o sistema é mapeado no modelo de Ising antiferromagnético. Este sistema é altamente frustrado, e na presença de um campo magnético externo H exhibe estados fundamentais multidegenerados que possuem entropia residual. Isto é consequência da geometria da rede fcc que pode ser dividida em quatro sub-redes, A , B , C e D (ver Figura 4-3).

Figura 4-3: Rede FCC



(a) A rede fcc pode ser dividida em quatro sub-redes, representadas acima em diferentes tons de cinza. Sítios de uma sub-rede só interagem com sítios pertencentes às outras três. O tetraedro em traço grosso é o menor conjunto de sítios acoplados que contém representantes das quatro sub-redes. Os traços finos **não** ligam sítios interagentes e servem apenas para a visualização da geometria fcc.

(b) Usamos uma rede cúbica simples com a adição de interações em três direções diagonais para a simulação de uma rede fcc. Nesta figura todas as traços representam acoplamento entre sítios, aqui apenas destacamos em traços grossos o tetraedro equivalente da rede fcc original.

Um sítio pertencente a uma sub-rede interage com quatro sítios de cada uma das

outras três sub-redes, totalizando doze vizinhos. Este arranjo impede que todas as ligações antiferromagnéticas sejam simultaneamente satisfeitas.

Para um campo externo $0 < H < 4J$, existe a possibilidade de ocorrência de uma fase ordenada $CuAu$ em que duas sub-redes se alinham na direção do campo enquanto as outras duas apontam na direção oposta. A outra possibilidade de fase ordenada Cu_3Au é dada para um campo externo $4J < H < 12J$ na qual três sub-redes se alinham na direção do campo e apenas uma na direção contrária. Dois pontos interessantes são encontrados para valores críticos de campo $H_1 = 4J$ e $H_2 = 12J$. Em ambos os casos vemos que o custo energético de inversão dos estados de spin (ou da troca $Au \rightarrow Cu$) de uma sub-rede orientada na direção oposta ao campo é exatamente compensado pela energia fornecida pelo campo externo. Logo o estado fundamental para estes valores de campo devem apresentar uma entropia residual mínima por spin $\frac{s}{k} = \frac{1}{4} \ln(2)$.

Apesar de não terem sido rigorosamente provadas, a existência destas fases é universalmente aceita [Meirovitch, 1984], [Styer, 1985], [Lebowitz et al., 1985], [Finel and Ducastelle, 1986]. Os resultados disponíveis indicam que as três fases exibidas pelo sistema são separadas por três linhas de transição de primeira ordem que se encontram em um ponto triplo, localizado a campo $H = H_1$. A linha que separa a fase $CuAu$ da fase desordenada, parte deste ponto e termina no ponto crítico $H = 0$ e temperatura T_1 . A linha que separa a outra fase ordenada Cu_2Au da fase desordenada termina a temperatura nula e campo crítico $H = H_2$. A terceira linha de transição de primeira ordem separa as duas fases ordenadas, e une o ponto triplo ao ponto $H = H_1$ de temperatura nula. Há alguma controvérsia se esta última linha realmente existe ou não. Isto é, se a localização do ponto triplo se dá a temperatura finita ou se a fase desordenada avança até o ponto $H = H_1$ e $T = 0$ que separa as duas fases ordenadas.

Nós investigamos a entropia do sistema em função da temperatura para três valores de campo externo: os dois valores críticos $H = H_1$ e $H = H_2$, onde se espera encontrar entropia residual, e também o sistema a campo nulo.

A rede fcc pode ser mapeada em uma rede cúbica simples com a adição de três liga-

ções diagonais conforme ilustrado na Figura 4-3(b) (os índices i e j a seguir identificam os elementos das matrizes “paralelas ao papel” e o índice k numera os planos “saindo do papel”), de modo que a hamiltoniana antiferromagnética de Ising fica

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} \mathcal{H}_{ijk}, \quad (4.18)$$

onde

$$\mathcal{H}_{ijk} = J\sigma_{ijk}(\sigma_{ij,k+1} + \sigma_{i,j+1,k} + \sigma_{i+1,j,k} + \sigma_{i+1,j+1,k} + \sigma_{i,j+1,k+1} + \sigma_{i+1,j+1,k+1}) - H\sigma_{i,j,k}. \quad (4.19)$$

onde usamos condições periódicas de contorno. A hamiltoniana “entre as camadas” k e $k+1$ é dada através das duas somas internas à expressão acima,

$$\mathcal{H}_{k,k+1} = \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} \mathcal{H}_{ijk}. \quad (4.20)$$

O número de spins de cada camada é dado $N = N_1 \times N_2$ e o sistema possui K camadas. Os elementos de matriz de transferência 3.2 entre os estados $\sigma_k = \{\sigma_{ijk}\}$ e $\sigma_{k+1} = \{\sigma_{ij,k+1}\}$ são dados por

$$T(\sigma_k, \sigma_{k+1}) = \exp(-\beta \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} \mathcal{H}_{ijk}). \quad (4.21)$$

4.4.1 Resultados

Simulamos o antiferromagneto de Ising na rede fcc em uma rede de $4 \times 4 \times 16$ sítios em um procedimento análogo ao executado para a rede triangular. A maior parte das simulações deste caso também foram feitas com 10000 PMC, a partir de um estado escolhido ao acaso. Para o cálculo destas médias usamos as transformações invariantes devido às condições periódicas de contorno 4.11, de modo que comparamos $N_1 \times N_2$ possibilidades de camadas.

Calculamos a entropia em função da temperatura para os valores de campo magnético

externo $H = 12J$ e $H = 4J$ e para campo nulo. Na Figura 4-4 apresentamos os gráficos da entropia por sítio s em função da temperatura obtidos nas simulações de Monte Carlo destes três casos. Para $H = H_2 = 12J$ o sistema permanece desordenado para todas as temperaturas e seu estado fundamental apresenta entropia residual. Para $H < 12J$ o sistema pode apresentar uma fase ordenada se a temperatura for suficientemente baixa. As transições entre a fase desordenada e as fases ordenadas são sempre de primeira ordem. Para $H = 4J$, o sistema também possui entropia residual. Em $H = 0$ observamos que a entropia se anula à medida que a temperatura decresce e que o sistema apresenta uma transição de primeira ordem em torno de $kT/J = 1.7$.

Na tabela 4.1 apresentamos nossas estimativas de Monte Carlo para as entropias residuais apresentadas pelo sistema em $H = 4J$ e $H = 12J$ juntamente com valores respectivos obtidos na literatura.

Tabela 4.1: Estimativas de entropias residuais para os valores de campo crítico $H_1 = 4J$, s_1 , e $H_2 = 12J$, s_2 , segundo diversos autores. Os métodos usados são: Monte Carlo (MC), de algoritmos diretos e indiretos; variacional de cluster (CVM), em aproximações de tetraedro (T) e octaedro-tetraedro (TO); e campo médio (limite inferior).

Método	Referência	s_1/k	s_2/k
MC direto	<i>este trabalho</i>	0,235(1)	0,2498(3)
MC direto	[Meirovitch, 1984]	0,239(1)	0,24989(2)
MC indireto	[Binder, 1981]	0,2310	0,2310
Campo médio	[Finel and Ducastelle, 1986]	>0,1733	>0,1733
T-CVM	[Finel and Ducastelle, 1986]	0,22735	0,2479
TO-CVM	[Finel and Ducastelle, 1986]	0,23072	0,252

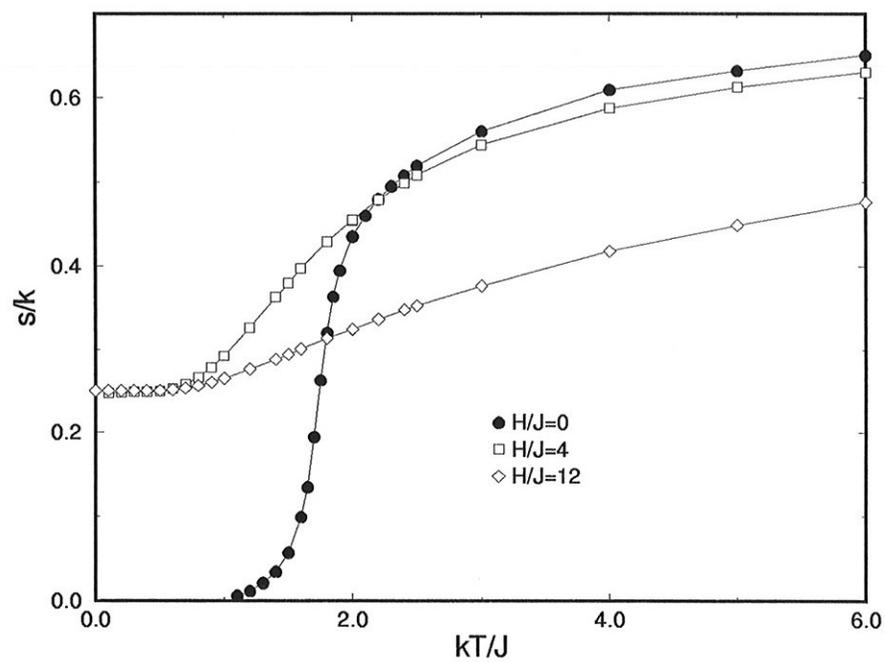


Figura 4-4: Entropia por sítio s em função da temperatura T para o anti-ferromagneto de Ising na rede cúbica de face centrada para vários valores de campo externo H .

Capítulo 5

Modelo de Heisenberg

As propriedades magnéticas de sólidos isolantes são descritas pelo modelo razoavelmente simples proposto por Heisenberg. O modelo se aplica a qualquer material monocristalino formado por átomos ou ânions de apenas um elétron de valência, ou seja, um único elétron além de suas camadas eletrônicas completas. Heisenberg e Dirac descobriram em trabalhos independentes [Mattis, 1981] que o acoplamento entre os estados de spins de elétrons localizados deve-se às forças elétricas de Coulomb e ao princípio da exclusão de Pauli em um fenômeno essencialmente quântico, conhecido atualmente como “interação de troca” (“exchange coupling”, em inglês). Para entendermos como forças puramente elétricas condicionam os estados de spin dos elétrons devemos considerar que o princípio da exclusão de Pauli impõe que a função de onda total dos elétrons, ou seja, o produto de sua parte orbital por sua parte de spin, deve ser antissimétrica. Sejam ψ_s e ψ_a as autofunções orbitais simétrica e antissimétrica de mais baixas energias de, E_s e E_a , isto é, são soluções da equação de Schrödinger da hamiltoniana de interações puramente eletrostáticas entre as cargas. O grau de liberdade remanescente do sistema, ou seja, seu estado de spin estará determinado pelo estado orbital eletrostático que tiver mais baixa energia. Por exemplo, considerando inicialmente apenas o caso de dois elétrons localizados em torno dos sítios i e j , e utilizando os autovetores do operador S^z de cada

sítio para representar seus estados de spin, temos as quatro possibilidades:

$$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle. \quad (5.1)$$

O símbolo $|\sigma_i\sigma_j\rangle$, onde $\sigma_i = \pm 1$, indica que o sítio i e j estão em estados de spin com projeção z definidas de valores $\pm\frac{1}{2}\hbar\sigma_i$, respectivamente. A partir desta base construímos os estados de spins de paridade definida. Há um estado antissimétrico,

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle), \quad (5.2)$$

e três estados simétricos,

$$|++\rangle,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), \quad (5.3)$$

$$|--\rangle.$$

Estes estados formam uma base ortonormal descrita pelo operador de spin total do sistema $\vec{S} = (\vec{S}_i + \vec{S}_j)$. Eles são autoestados de seu módulo quadrado, $\vec{S}^2 = (\vec{S}_i^2 + \vec{S}_j^2 + 2\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)$, com autovalores $S(S+1)\hbar^2$, e de sua projeção z , S^z , com autovalores $M\hbar$. O estado antissimétrico, chamado singleto possui $S = 0$ e $M = 0$. Os estados simétricos formam o tripleto de $S = 1$, e $M = +1, 0$ e -1 , respectivamente. Se E_a for a menor energia então a função de onda de spin deverá ser simétrica, ou seja, a interação elétrica favorecerá a orientação dos spins na mesma direção representados pelos estados tripletos, logo o sistema exibirá um comportamento ferromagnético. A outra possibilidade seria um estado fundamental orbital simétrico, $E_s < E_a$, o que obrigaria o estado de spin a ser antissimétrico, ou seja, os spins se orientariam antiparalelamente e o sistema teria um comportamento antiferromagnético. Logo podemos substituir a interação original

eletrostática pelo operador de spin,

$$\frac{1}{4}(E_s + 3E_a) - \frac{1}{\hbar^2}(E_s - E_a)\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (5.4)$$

que tem a propriedade desejada de apresentar autovalor de energia E_s para estado de spin singleto, e E_a para os estados de spin tripleto (o operador $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ tem autovalor $-\frac{3}{4}\hbar^2$ no estado singleto e $\frac{1}{4}\hbar^2$ no estado triplete). Generalizando este argumento para um sistema com N elétrons localizados nos sítios de uma rede, poderíamos pensar em substituir a hamiltoniana original eletrostática, por uma hamiltoniana de spin em que a interação eletrostática entre cada par de sítios vizinhos i e j seria substituída por operadores análogos ao operador de spin acima. Esta aproximação é válida para o caso em que os N sítios da rede estão próximos o bastante para quebrar a 2^N -degenerescência de seus estados de spin, mas suficientemente afastados para que a diferença de energia entre seus estados simétrico e antissimétrico mais baixos sejam menores que outras excitações do sistema. O estudo desta quebra de degenerescência, que envolve, como vimos, a ordem magnética do sistema, pode ser obtida substituindo a hamiltoniana original eletrostática, pela hamiltoniana de Heisenberg bem mais simples dada por

$$\mathcal{H} = J_0 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (5.5)$$

A interação $J_0 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ é denominada de “interação de troca”. Aqui J_0 é uma constante que depende do parâmetro da rede cristalina. Como vimos acima ele deve ser proporcional à diferença de energia entre os estados simétrico e antissimétrico de mais baixa energia, $E_a - E_s$, da hamiltoniana original do sistema. Esta grandeza, evidentemente, depende das distâncias entre os sítios em torno dos quais os elétrons estão localizados, decrescendo rapidamente com o aumento destas [Ashcroft and Mermin, 1988], [Mattis, 1981]. Na hamiltoniana acima considera-se que somente interações entre primeiros vizinhos são relevantes o que é indicado pelo símbolo $\langle i,j \rangle$ sob a somatória. Dependendo do sinal de J_0 o sistema exibirá ou um comportamento ferromagnético, $J_0 > 0$, ou antiferromagnético

$J_0 > 0$.

Um estado da rede, $|\sigma\rangle$, é definido pelos estados de spin de cada um de seus sítios. Usando os espinores de cada sítio $|\sigma_i\rangle$, $\sigma_i = \pm 1$, representamos os estados do sistema através de vetores N -dimensionais, obtidos pelo espaço produto destes espinores,

$$|\sigma\rangle = \underbrace{|\sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_i\cdots\sigma_N\rangle}_{N \text{ termos}} = \underbrace{|\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle \cdots |\sigma_i\rangle \cdots |\sigma_N\rangle}_{N \text{ termos}}, \quad (5.6)$$

onde N é o número de sítios da rede. A variável σ , sem sub-índice se refere ao estado do sistema como um todo, portanto o conjunto de seus valores, $\{\sigma\}$, possui 2^N elementos.

O operador vetorial de spin \vec{S}_i atua como se fosse operador identidade I sobre todos os sítios exceto o sítio i , onde atua como o operador usual de spin, ou seja, é definido através do produto tensorial

$$\vec{S}_i = \underbrace{I \otimes I \otimes I \cdots I}_{i-1 \text{ termos}} \otimes \vec{S} \otimes I \cdots I \otimes I, \quad (5.7)$$

em que o operador vetorial de spin \vec{S} de uma partícula é

$$\vec{S} = S^x \hat{x} + S^y \hat{y} + S^z \hat{z}. \quad (5.8)$$

As componentes cartesianas, S^x , S^y e S^z , são operadores que obedecem as relações de comutação,

$$[S^x, S^y] = i\hbar S^z, \quad [S^z, S^x] = i\hbar S^y, \quad [S^y, S^z] = i\hbar S^x. \quad (5.9)$$

Para sistemas de spin $-\frac{1}{2}$ estes operadores são dados pelas matrizes de Pauli

$$S^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

Imediatamente identificamos os autoespinores do operador S^z pelas matrizes colunas:

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Para facilitar a notação futura iremos adotar unidades em que a constante de Planck é unitária, ou seja, faremos $\hbar = 1$. Desenvolvendo o produto escalar na hamiltoniana de Heisenberg, temos:

$$\mathcal{H} = J_0 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) \quad (5.12)$$

Cada termo da somatória da hamiltoniana de Heisenberg é um operador de “dois sítios”, definido analogamente à 5.7, ou seja, através do produto tensorial de matrizes identidade e de matrizes de Pauli 5.10, de forma que somente os espinores dos sítios i e j , no caso primeiros vizinhos, são afetados de cada vez. Também é importante observar que operadores atuantes em sítios diferentes sempre comutam, mas operadores atuantes no mesmo sítio obedecem as relações de comutação introduzidas em 5.9. A hamiltoniana de Heisenberg é isotrópica portanto deve comutar com o operador gerador de rotações em seu espaço, que é o operador spin total \vec{S}_{TOT} ,

$$\vec{S}_{TOT} = \sum_i \vec{S}_i. \quad (5.13)$$

As projeções cartesianas do spin total do sistema obedecem entre si a relações de comutação análogas às relações 5.9, logo o módulo de \vec{S}_{TOT} e uma de suas projeções podem ser usados como os “bons números quânticos” que rotularão os autoestados da hamiltoniana de Heisenberg

$$\mathcal{H}\Psi_{S,M} = E_{S,M}\Psi_{S,M}, \quad (5.14)$$

$$\vec{S}_{TOT}^2 \Psi_{S,M} = S(S+1)\Psi_{S,M}, \quad (5.15)$$

$$S_{TOT}^z \Psi_{S,M} = M\Psi_{S,M}. \quad (5.16)$$

Naturalmente a componente z do spin total do sistema, é dada por:

$$S_{TOT}^z = \sum_i S_i^z \quad (5.17)$$

e seus autovalores $M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2}$, variam, para cada valor de S , no intervalo $-S \leq M \leq S$ (supondo que o número N de spins da rede seja par). Os vetores da base 5.6 são os autovetores do operador S_{Tot}^z ,

$$S_{TOT}^z |\sigma\rangle = M |\sigma\rangle, \quad (5.18)$$

ou seja cada vetor $|\sigma\rangle$ da base adotada possui um valor M definido. Frequentemente omitiremos os sub-índices dos autoestados $\Psi_{S,M}$ e de seus autovalores $E_{S,M}$, escrevendo simplesmente Ψ e E . Nestes casos devemos considerá-los implícitos como o fazemos ao representar um estado da rede por $|\sigma\rangle$ ao invés de $|\sigma_M\rangle$.

Para melhor entendermos a ação da hamiltoniana de Heisenberg, vamos introduzir os operadores de levantamento S^+ e abaixamento S^- :

$$S^+ = S^x + iS^y, \quad S^- = S^x - iS^y. \quad (5.19)$$

A ação destes operadores sobre os autoespiniores de S^z é facilmente verificada com uso da notação matricial 5.10 e 5.11, que se traduz nas seguintes regras:

$$\begin{aligned} S^+ |+\rangle &= 0, & S^- |+\rangle &= |-\rangle, \\ S^- |-\rangle &= 0, & S^+ |-\rangle &= |+\rangle. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Podemos construir operadores de levantamento e abaixamento que atuam somente no estado de um sítio da rede, conforme a prescrição 5.7, para reescrever a hamiltoniana de Heisenberg na forma

$$\mathcal{H} = J_0 \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)]. \quad (5.21)$$

A ação da hamiltoniana sob a base dos autoespinores de S^z é composta de dois termos. O primeiro,

$$\mathcal{H}_0 = J_0 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z, \quad (5.22)$$

é diagonal nesta representação. A ação de cada termo $S_i^z S_j^z$ sobre um estado da rede $|\sigma\rangle$, resulta em $-\frac{J_0}{4}$ se os sítios vizinhos i e j estão em estados de spin opostos e $\frac{J_0}{4}$ se estão no mesmo estado. Definindo $N_a(\sigma)$ como o número total de primeiros vizinhos do estado $|\sigma\rangle$ em estados de spin antiparalelos, temos

$$\mathcal{H}_0 |\sigma\rangle = [N_p - 2N_a(\sigma)] \frac{J_0}{4} |\sigma\rangle, \quad (5.23)$$

onde N_p é o número de pares de sítios primeiros vizinhos da rede cristalina. Por exemplo, a ação de \mathcal{H}_0 sobre o estado da cadeia de quatro spins abaixo em que adotamos condições periódicas de contorno, ou seja, o primeiro e o último sítio estão conectados, resulta em:

$$\mathcal{H}_0 |+-+-\rangle = (4 - 2 \cdot 4) \frac{J_0}{4} |+-+-\rangle. \quad (5.24)$$

Para analisar a ação da parte não secular da hamiltoniana,

$$\mathcal{H}_1 = \frac{J_0}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+), \quad (5.25)$$

devemos observar que cada termo que compõe a somatória apenas troca os estados dos

pares de vizinhos que são antiparalelos. De acordo com as regras 5.20, temos:

$$\frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \left\{ \begin{array}{l} |++\rangle = 0 \\ |+-\rangle = \frac{1}{2}| -+\rangle \\ |-+\rangle = \frac{1}{2}|+-\rangle \\ |--\rangle = 0 \end{array} \right. \quad (5.26)$$

A cada par de primeiros vizinhos antiparalelos, que denominaremos doravante par “antiferro”, a parte não secular da hamiltoniana produz um estado que difere deste apenas pela inversão dos estados deste par. Por exemplo, aplicando \mathcal{H}_1 sobre o estado de uma cadeia de quatro spins,

$$\mathcal{H}_1 |+-+-\rangle = \frac{J_0}{2} \{ |-++-\rangle + |++--\rangle + |+- -+\rangle + |--++\rangle \}. \quad (5.27)$$

Logo os elementos não diagonais de \mathcal{H} conectam apenas estados $\tilde{\sigma}$ e σ que diferem por um único par de primeiros vizinhos antiparalelos, ou seja:

$$\langle \tilde{\sigma} | \mathcal{H}_1 | \sigma \rangle = \begin{cases} \frac{J_0}{2}, & \text{se } \tilde{\sigma} \text{ e } \sigma \text{ diferem por apenas um par "antiferro",} \\ 0, & \text{de outro modo.} \end{cases} \quad (5.28)$$

Portanto a parte não secular da hamiltoniana também relaciona apenas termos de determinado valor de M .

As expressões 5.23 e 5.28 dividem o problema da solução do modelo de Heisenberg em problemas de autovalores dentro de sub-espços de valor M definido sem impor condição alguma sobre a isotropia do sistema. O mesmo valeria para o caso da hamiltoniana de Heisenberg anisotrópica $\mathcal{H}_a = \mathcal{H}_o + \varepsilon \mathcal{H}_1$, em que o parâmetro ε introduz uma anisotropia

rotacional que favorece a direção z em detrimento das outras. Neste caso, apenas o spin total do sistema, S , deixaria de ser um “bom número quântico”.

5.1 O Estado Fundamental

Agora devemos fazer a distinção entre sistemas ferromagnéticos e antiferromagnéticos. No primeiro caso, $J_0 < 0$, os estados de spins de todos os sítios tendem a se alinhar no mesmo sentido. A identificação de seu estado fundamental é imediata e corresponde ao caso em que todos os sítios da rede estão no mesmo estado:

$$\Psi_o^{FERRO} = |++++ \cdots +++++\rangle, \text{ ou } \Psi_o^{FERRO} = |-----\rangle. \quad (5.29)$$

Estes dois estados são auto-estados da hamiltoniana de Heisenberg e possuem energia,

$$E_o^{FERRO} = -\frac{|J_0|}{4} N_p, \quad (5.30)$$

onde N_p é o número de pares de sítios primeiros vizinhos da rede cristalina. O modelo ferromagnético quântico de Heisenberg possui o mesmo estado fundamental de seu equivalente semi-clássico o modelo de Ising. O mesmo não ocorre para sistemas antiferromagnéticos, em que $J_0 > 0$. Neste caso spins vizinhos tendem a se orientar antiparalelamente, contudo o equivalente quântico ao estado de Néel,

$$\Psi_o^{Néel} = |+-+ \cdots -+-\rangle, \text{ ou } \Psi_o^{Néel} = |-+- \cdots +-+\rangle. \quad (5.31)$$

nem sequer é um auto-estado da hamiltoniana de Heisenberg, como pode ser facilmente observado em 5.26. Os estados ferromagnéticos 5.29, continuam sendo autoestados da hamiltoniana de Heisenberg, porém agora são os estados de máxima energia. Somente para o caso unidimensional foi determinado, no limite termodinâmico, o estado fundamental e a sua respectiva energia por Bethe e Hulthén [Caspers, 1989].

Nesta seção mostraremos que propriedades exatas do estado fundamental antiferromagnético podem ser obtidas de características gerais da rede cristalina do sistema. A única suposição será a de tratarmos com sistemas não frustrados, isto é, sistemas que possam ser divididos em duas sub-redes nas quais os sítios pertencentes a uma sub-rede estão acoplados somente a sítios da outra. Finalmente é possível mostrar que o estado fundamental do sistema antiferromagnético de Heisenberg deve estar contido no bloco de autofunções de números quânticos $M = 0$ e $S = 0$.

O ponto de partida desta demonstração consiste em submeter a hamiltoniana de Heisenberg à transformação canônica que produz uma rotação de 180° , em torno do eixo z , em apenas uma das sub-redes do sistema, digamos a sub-rede A . O operador que a executa é o operador unitário:

$$\mathcal{A} = e^{i\pi\hat{z}\cdot\vec{S}_A} = e^{i\pi S_A^z}, \quad (5.32)$$

onde introduzimos o operador de spin da sub-rede A ,

$$\vec{S}_A = \sum_{i \in A} \vec{S}_i, \quad S_A^z = \sum_{i \in A} S_i^z. \quad (5.33)$$

A transformação canônica da hamiltoniana de Heisenberg,

$$\mathcal{H}' = \mathcal{A}^\dagger \mathcal{H} \mathcal{A}, \quad (5.34)$$

executa as seguintes transformações:

$$S_{i \in A}^x \rightarrow -S_{i \in A}^x, \quad S_{i \in A}^y \rightarrow -S_{i \in A}^y, \quad S_{i \in A}^z \rightarrow S_{i \in A}^z, \quad (5.35)$$

mantendo os operadores da sub-rede B inalterados. Esta transformação apenas troca o sinal da parte não secular da hamiltoniana de Heisenberg, assim escrevemos a hamiltono-

niana \mathcal{H}' em termos de 5.22 e 5.25 na forma:

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}_0 - \mathcal{H}_1 \quad (5.36)$$

Facilmente verificamos que a hamiltoniana \mathcal{H}' possui o mesmo espectro que a hamiltoniana original de Heisenberg. Basta multiplicar a equação 5.14 pelo operador \mathcal{A}^\dagger e introduzir convenientemente o operador identidade $\mathcal{I} = \mathcal{A}\mathcal{A}^\dagger$,

$$(\mathcal{A}^\dagger \mathcal{H} \mathcal{A}) \mathcal{A}^\dagger \Psi = E \mathcal{A}^\dagger \Psi, \quad (5.37)$$

para se transformar na equação de autovalores para a hamiltoniana \mathcal{H}' ,

$$\mathcal{H}' \Phi = E \Phi. \quad (5.38)$$

Esta equação possui o mesmo espectro de energia E da hamiltoniana de Heisenberg. Os seus autovetores Φ se relacionam com os autovetores da hamiltoniana \mathcal{H} pela transformação canônica

$$\Phi = \mathcal{A}^\dagger \Psi, \quad \Psi = \mathcal{A} \Phi. \quad (5.39)$$

O estado fundamental da hamiltoniana \mathcal{H}' dentro do sub-espço de autovalor M do operador S_{TOT}^z pode ser expandido usando a base 5.6,

$$\Phi = \sum_{\{\sigma\}_M} C_\sigma |\sigma\rangle. \quad (5.40)$$

A notação $\{\sigma\}_M$ indica a soma sobre todas as configurações da rede de valor M definido, ou seja, que satisfazem a equação 5.18. Se reescrevermos a equação secular 5.23 na forma mais compacta

$$\mathcal{H}_0 |\sigma\rangle = \epsilon_\sigma |\sigma\rangle, \quad (5.41)$$

podemos usar a equação de autovalores de \mathcal{H}' para obter uma equação para os coeficientes

C_σ ,

$$- \sum_{\{\tilde{\sigma}\}_M} \langle \tilde{\sigma} | \mathcal{H}_1 | \sigma \rangle C_{\tilde{\sigma}} + \epsilon_\sigma C_\sigma = E_M C_\sigma. \quad (5.42)$$

Rearranjando os termos desta equação e considerando seu módulo, temos

$$\left| \sum_{\{\tilde{\sigma}\}_M} \langle \tilde{\sigma} | \mathcal{H}_1 | \sigma \rangle C_{\tilde{\sigma}} \right| = (\epsilon_\sigma - E_M) |C_\sigma|, \quad (5.43)$$

onde $(\epsilon_\sigma - E_M) \geq 0$, pois de outra forma um dos estados $|\sigma\rangle$ seria o próprio estado fundamental.

Podemos buscar uma solução aproximada para o estado fundamental de \mathcal{H}' através do método variacional. Usaremos uma função tentativa, Φ' , na qual os números complexos C_σ de 5.40 são substituídos por seus módulos $|C_\sigma|$,

$$\Phi' = \sum_{\{\sigma\}_M} |C_\sigma| |\sigma\rangle. \quad (5.44)$$

A função tentativa, que também é normalizada $\langle \Phi | \Phi \rangle = \langle \Phi' | \Phi' \rangle$, deve apresentar uma energia maior ou igual à energia do estado fundamental,

$$\langle \Phi' | \mathcal{H}' | \Phi' \rangle \geq E_M. \quad (5.45)$$

Portanto os coeficientes $|C_\sigma|$ devem satisfazer à condição

$$- \sum_{\{\tilde{\sigma}\}_M} \langle \tilde{\sigma} | \mathcal{H}_1 | \sigma \rangle |C_{\tilde{\sigma}}| + \epsilon_\sigma |C_\sigma| \geq E_M |C_\sigma|. \quad (5.46)$$

Usando 5.43 para substituir o termo $(\epsilon_\sigma - E_M) |C_\sigma|$ na expressão acima, temos finalmente

$$\sum_{\{\tilde{\sigma}\}_M} \langle \tilde{\sigma} | \mathcal{H}_1 | \sigma \rangle |C_{\tilde{\sigma}}| \leq \left| \sum_{\{\tilde{\sigma}\}_M} \langle \tilde{\sigma} | \mathcal{H}_1 | \sigma \rangle C_{\tilde{\sigma}} \right|. \quad (5.47)$$

Em sistemas antiferromagnéticos, de acordo com 5.28, todos os elementos $\langle \tilde{\sigma} | \mathcal{H}_1 | \sigma \rangle$

são positivos, portanto esta expressão tem a forma de uma desigualdade triangular que só pode ser satisfeita se os coeficientes C_σ forem todos positivos (exceto por uma fase comum irrelevante),

$$C_\sigma \geq 0, \quad \text{para qualquer } \sigma. \quad (5.48)$$

Podemos impor uma condição ainda mais forte sobre estes coeficientes. De acordo com 5.26, todos estados $|\sigma\rangle$ dentro de cada sub-espço M podem ser obtidos através de sucessivas aplicações de \mathcal{H}_1 sobre um estado em particular, portanto não pode haver um só coeficiente nulo, ou todos o seriam. Se por hipótese, o coeficiente C_{σ_p} do estado particular $|\sigma_p\rangle$ for nulo, a equação 5.43 para este estado será $\sum_{\{\tilde{\sigma}\}_M} \langle \tilde{\sigma} | \mathcal{H}_1 | \sigma_p \rangle C_{\tilde{\sigma}} = 0$, em que cada termo da somatória é positivo. Conseqüentemente, os coeficientes de todos os estados diferentes de $|\sigma_p\rangle$ por um par “antiferro” invertido, ou seja, todos os estados para os quais $\langle \tilde{\sigma} | \mathcal{H}_1 | \sigma_p \rangle \neq 0$, também devem ser nulos. Repetindo sucessivamente este procedimento a partir dos novos estados de coeficientes nulos que somos forçados a admitir, chegamos ao ponto absurdo no qual os coeficientes de todos os estados devem ser nulos. Logo, a hipótese inicial não é válida, ou seja, os coeficientes são estritamente positivos,

$$C_\sigma > 0, \quad \text{para qualquer } \sigma. \quad (5.49)$$

Portanto o estado fundamental para cada valor de M da hamiltoniana de Heisenberg não é degenerado, uma vez que não pode haver dois estados ortogonais de coeficientes estritamente positivos. A restrição 5.49 nada mais é do que o critério de *Marshall* [1955] para a forma do estado fundamental do modelo de Heisenberg antiferromagnético. Normalmente ele é apresentado sobre os coeficientes da expansão do estado fundamental da hamiltoniana \mathcal{H} ,

$$\Psi = \sum_{\{\sigma\}_M} a_\sigma |\sigma\rangle. \quad (5.50)$$

Para identificarmos as restrições sobre os coeficientes a_σ impostas por 5.49, basta substi-

tuir as expansões de Ψ e Φ na expressão 5.39 , da qual obtemos:

$$\sum_{\{\sigma\}_M} a_\sigma |\sigma\rangle = \sum_{\{\sigma\}_M} C_\sigma \mathcal{A}^\dagger |\sigma\rangle. \quad (5.51)$$

Os vetores $|\sigma\rangle$ também são autovetores do operador \mathcal{A}^\dagger , de acordo com 5.32 seus autovalores são $e^{-i\pi M_A}$ onde M_A é a magnetização de apenas uma das sub-redes, ou seja, é autovalor do operador S_A^z . Se considerarmos dois estados $|\sigma\rangle$ e $|\tilde{\sigma}\rangle$ que diferem por um par “antiferro” invertido, então a diferença $M_A(\sigma) - M_A(\tilde{\sigma}) = \pm 1$, logo, desprezando novamente uma fase irrelevante, temos a condição $a_\sigma \cdot a_{\tilde{\sigma}} < 0$, ou seja, dois estados que estejam conectados por \mathcal{H}_1 , entram na expansão 5.50 com sinais opostos.

Dentro de cada sub-espaco M existem autoestados da hamiltoniana de Heisenberg de autovalores de spin total $S = |M|, |M| + 1, \dots, N/2$. Para demonstrar que o estado fundamental corresponde ao estado de $S = |M|$ [Lieb and Mattis, 1962], definimos a hamiltoniana especial,

$$\mathcal{H}_{esp} = \vec{S}_{TOT}^2 - \vec{S}_A^2 - \vec{S}_B^2, \quad (5.52)$$

em que introduzimos o operador de spin da sub-rede B :

$$\vec{S}_B = \sum_{i \in B} \vec{S}_i.$$

Naturalmente, o operador de spin total do sistema 5.13, é dado pela soma dos operadores de spin de cada sub-rede,

$$\vec{S}_{TOT} = \vec{S}_A + \vec{S}_B, \quad (5.53)$$

A hamiltoniana especial \mathcal{H}_{esp} comuta com os operadores \vec{S}_{TOT}^2 , S_{TOT}^z , \vec{S}_A^2 e \vec{S}_B^2 , que escolhemos como conjunto de observáveis deste sistema, ou seja, usaremos seus autovalores S , M , S_A e S_B para rotular os auto-estados $\phi = \phi_{S,M,S_A,S_B}$ da equação

$$\mathcal{H}_{esp}\phi = [S(S+1) - S_A(S_A+1) - S_B(S_B+1)]\phi. \quad (5.54)$$

O estado fundamental desta hamiltoniana dentro de cada sub-espço M possui a propriedade desejada $S = |M|$. Usando 5.53, reescrevemos a hamiltoniana \mathcal{H}_{esp} na forma

$$\mathcal{H}_{esp} = (\vec{S}_A + \vec{S}_B)^2 - \vec{S}_A^2 - \vec{S}_B^2 = 2\vec{S}_A \cdot \vec{S}_B, \quad (5.55)$$

ou em termos das projeções cartesianas dos operadores de spin total de cada sub-rede

$$\mathcal{H}_{esp} = 2(S_A^x \cdot S_B^x + S_A^y \cdot S_B^y + S_A^z \cdot S_B^z). \quad (5.56)$$

Submetendo esta hamiltoniana à transformação canônica 5.34, temos

$$\mathcal{H}'_{esp} = \mathcal{A}^\dagger \mathcal{H}_{esp} \mathcal{A} = 2(-S_A^x \cdot S_B^x - S_A^y \cdot S_B^y + S_A^z \cdot S_B^z), \quad (5.57)$$

que escrevemos na forma

$$\mathcal{H}'_{esp} = \mathcal{H}_{esp0} - \mathcal{H}_{esp1}, \quad (5.58)$$

em que dividimos no termo diagonal na base $|\sigma\rangle$,

$$\mathcal{H}_{esp0} = 2S_A^z \cdot S_B^z, \quad (5.59)$$

e no termo não diagonal,

$$\mathcal{H}_{esp1} = 2(S_A^x \cdot S_B^x + S_A^y \cdot S_B^y). \quad (5.60)$$

A hamiltoniana especial possui uma forma análoga à 5.36, em que a interação entre pares de vizinhos mais próximos é substituída pela interação entre todos os sítios da sub-rede A com todos os sítios da sub-rede B . A expressão 5.28 pode ser generalizada para os elementos não diagonais da hamiltoniana especial, basta considerar o par “antiferro” como sendo formado por dois sítios pertencentes a sub-redes diferentes, não necessariamente

primeiros vizinhos,

$$\langle \tilde{\sigma} | \mathcal{H}_{esp_1} | \sigma \rangle = \begin{cases} 1, & \text{se } M(\sigma) = M(\tilde{\sigma}) \text{ e } |M_A(\sigma) - M_A(\tilde{\sigma})| = 1, \\ 0, & \text{de outro modo.} \end{cases} \quad (5.61)$$

Se repetirmos os passos 5.42 a 5.49 para a expansão do estado fundamental ϕ da hamiltoniana especial na base $|\sigma\rangle$ verificaremos que todos seus coeficientes devem ser estritamente positivos. Como o estado fundamental Φ da hamiltoniana \mathcal{H}' também possui coeficientes positivos, segue que ϕ e Φ não podem ser ortogonais, portanto Φ pertence ao bloco de $S = |M|$. Logo o próprio estado fundamental Ψ da hamiltoniana de Heisenberg \mathcal{H} , dentro de cada bloco M , possui spin total $S = |M|$.

Devido à isotropia da hamiltoniana de Heisenberg, para um dado valor S , existem $2S+1$ estados degenerados, caracterizados pelos valores de M . Como dentro do sub-espaço $M = 0$ existem representantes de todos os valores de S , o auto-estado deste sub-espaço de spin total $S = M = 0$ é o estado fundamental de todo sistema, ou seja, se estivermos interessados nas propriedades do estado fundamental do modelo de Heisenberg basta estudar o sub-espaço $M = 0$.

5.2 A Matriz T

A demonstração do critério de *Marshall* [1955] e o fato do estado fundamental do anti-ferromagneto de Heisenberg não ser degenerado, que vimos na seção anterior, é também uma consequência do teorema de Perron-Frobenius [*Gantmacher*, 1960], enunciado na página 26.

Nós poderíamos identificar estas propriedades imediatamente após a transformação canônica da hamiltoniana de Heisenberg em 5.34, que levou à hamiltoniana \mathcal{H}' , com a qual iniciamos as demonstrações. Bastaria relacionar algebricamente \mathcal{H}' ao operador \mathcal{T}

definido por

$$\mathcal{T} = -2\mathcal{H}' + \frac{N_p}{2}, \quad (5.62)$$

ou

$$\mathcal{T} = 2 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + 2 \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\frac{1}{4} - S_i^z S_j^z \right), \quad (5.63)$$

onde consideramos a constante de acoplamento $J_o = 1$. Os autovalores E de \mathcal{H}' (e de \mathcal{H}) e λ de \mathcal{T} estão relacionados por,

$$E = -\frac{\lambda}{2} + \frac{N_p}{4}, \quad (5.64)$$

de modo que o maior autovalor de \mathcal{T} está relacionado ao estado fundamental da hamiltoniana de Heisenberg \mathcal{H} . De acordo com 5.23 e 5.28, a matriz T correspondente a este operador possui apenas elementos não negativos dados por

$$T(\tilde{\sigma}, \sigma) = \langle \tilde{\sigma} | \mathcal{T} | \sigma \rangle = \begin{cases} N_a(\sigma) & \text{se } \sigma = \tilde{\sigma}, \\ 1 & \text{se } \sigma \text{ e } \tilde{\sigma} \text{ diferem por apenas um par "antiferro",} \\ 0 & \text{de outro modo.} \end{cases} \quad (5.65)$$

Como era de se esperar a matriz T é bloco-diagonal sendo cada bloco rotulado pelo número quântico M . Novamente observamos que apenas os elementos diagonais e os termos que ligam estados diferentes por um único par de spins "antiferro" não se anulam. Como seus elementos são todos positivos ou nulos pode-se aplicar o teorema de Perron-Frobenius, dentro de cada bloco M da matriz T . Assim o autovetor dominante desta matriz não é degenerado e possui todas as suas componentes positivas. Como os auto-estados de \mathcal{H}' estão relacionados aos autovetores de \mathcal{T} , as propriedades do autovetor dominante de \mathcal{T} são iguais às propriedades do estado fundamental de \mathcal{H}' , de modo que indiretamente demonstramos o teorema de Perron-Frobenius quando chegamos à expressão 5.49.

Finalmente observamos que o método apresentado no capítulo 3 pode ser aplicado para investigar o estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg usando a matriz T dada em 5.65, pois esta satisfaz a condição de possuir apenas elementos não negativos.

Capítulo 6

Estado Fundamental do Antiferromagneto de Heisenberg na Rede Quadrada

6.1 Introdução

Recentemente o modelo de Heisenberg antiferromagneto quântico tem despertado interesse devido às suas relações com a supercondutividade a alta temperatura [Menousakis, 1991], [Barnes, 1991]. A solução exata para o estado fundamental do modelo de spin-1/2 em uma dimensão, através do “Ansatz de Bethe” [Caspers, 1989], mostra que este sistema não possui ordem de longo alcance. Entretanto, os resultados disponíveis do sistema na rede quadrada indicam que o estado fundamental do modelo de spin-1/2 é ordenado com uma magnetização em torno de 60% do valor de seu correspondente clássico. As flutuações quânticas diminuem a magnetização do sistema mas não são suficientes para destruir a ordem de longo alcance.

As propriedades do estado fundamental do modelo de spin-1/2 têm sido estudadas por várias técnicas como ondas de spin, [Nishimori and Miyake, 1985], métodos de grupo de renormalização [Pan, 1989], diagonalização exata [Oitmaa and Betts, 1978], [Tang

and Hirsh, 1989], [Dagotto and Moreo, 1989], [Lin, 1990], e métodos de Monte Carlo de temperatura nula [Gross et al., 1989], [Trivedi and Ceperley, 1989], [Trivedi and Ceperley, 1990]. A diagonalização exata foi calculada para sistemas pequenos com até 32 sítios. Métodos de Monte Carlo variacionais [Huse and Elser, 1988], [Liang and Anderson, 1988], métodos de Monte Carlo usando integral de caminho de temperatura finita [Gross et al., 1989], e simulações de Monte Carlo de temperatura nula foram utilizados no estudo de sistemas grandes.

O método apresentado no capítulo 3 para calcular o autovalor dominante de uma matriz de transferência de elementos não negativos, pode ser usado na determinação das propriedades do estado fundamental do modelo de Heisenberg constituindo um novo método de Monte Carlo de temperatura nula diferente daqueles já apresentados. Este método é uma versão estocástica do método da potência no qual o maior autovalor é obtido através de repetidas multiplicações de matrizes. No método que apresentamos, as propriedades do estado fundamental de um sistema de spins quânticos de dimensão d são transformadas em propriedades mecânico-estatísticas de um sistema com $(d + 1)$ dimensões. O acréscimo desta dimensão extra torna nosso método distinto dos outros métodos de Monte Carlo de temperatura nula. Por exemplo, os métodos de Monte Carlo que usam a função de Green [Carlson, 1989], [Trivedi and Ceperley, 1989], são baseados na iteração da equação $\psi_{n+1}(s') = \sum_s G(s', s)\psi_n(s)$, onde G é uma função qualquer da hamiltoniana que projeta o auto-estado. Para usar a simulação de Monte Carlo é preciso decompor $G(s', s)$ na forma do produto de uma probabilidade de transição $P(s', s)$ e uma função multiplicidade $m(s', s)$. Nosso método evita esta decomposição com a introdução da dimensão extra. Além disso, nosso método dispensa o uso de uma função tentativa como ocorre em outros métodos de Monte Carlo de temperatura nula.

Os resultados numéricos que obtivemos com nosso método estão em concordância com os resultados de soluções de diagonalização exata e dos outros métodos de Monte Carlo de temperatura nula. Esta é uma indicação de que nosso método pode dar resultados pelo menos tão bons quanto os calculados pelos outros métodos de Monte Carlo de

temperatura nula. Porém, como ocorre com os outros métodos, o nosso algoritmo só pode ser aplicado em sistemas quânticos que não contém o chamado “problema do sinal”, que em nosso caso, é traduzido pela restrição de lidarmos apenas com matrizes de elementos não negativos.

6.2 O Algoritmo

Na seção 5.2 vimos que a determinação das propriedades do estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg pode ser colocada na forma da determinação do maior autovalor da matriz T cujos elementos são dados em 5.65. Para aplicar o método de Monte Carlo apresentado no capítulo 3 devemos criar cópias do sistema bidimensional original a fim definir a probabilidade dada em 3.5 com a qual poderemos realizar a simulação.

Vamos considerar um sistema com K camadas onde cada camada é uma rede quadrada com $N = L \times L$ sítios. Podemos arranjar estas camadas na forma de uma rede cúbica como ilustrado na Figura 3-2. O sistema total possui $K \times N$ sítios sendo o estado de cada sítio definido pela variável de spin $\sigma_{ik} = \pm 1$, onde o índice $k = 1, 2, \dots, K$ refere-se às camadas e o índice i indica a posição de cada sítio dentro de sua respectiva camada. O estado de cada camada é dado pela variável $\sigma_k = \{\sigma_{ik}\}$, que possui apenas o índice da camada

Para que o produto em 3.5 não se anule, devemos iniciar o processo em uma configuração total da rede $\{\sigma_k\}$ tal que (a) para cada camada k temos $\sum_i \sigma_{ik} = 2M$ e (b) duas camadas consecutivas diferem no máximo por um par de primeiros vizinhos antiparalelos. O algoritmo deve ser construído de forma que estas duas propriedades sejam mantidas a cada passo da simulação.

A evolução do sistema é feita modificando-se o estado de uma camada do sistema de cada vez. A cada etapa devemos sortear uma camada k e tentar modificar sua configuração de acordo com os seguintes casos (ver Figura 6-1).

1. A camada escolhida é idêntica à camada anterior e à camada posterior. Neste caso, escolhemos ao acaso um dos $N_a(\sigma_k)$ pares de sítios primeiros vizinhos antiparalelos desta camada. A seguir, tentamos inverter os estados de spin deste par “antiferro” com uma probabilidade $1/ N_a(\sigma_k)$.
2. A camada anterior ($k - 1$) é idêntica à camada posterior ($k + 1$) mas distinta da camada escolhida (k) que difere de ambas por um único par de sítios primeiros vizinhos antiparalelos. Neste caso, os spins do par “antiferro” diferente são invertidos de modo que a camada k fique idêntica à suas camadas vizinhas.
3. A camada anterior ($k - 1$) é idêntica à camada escolhida (k) mas distinta da camada posterior ($k + 1$). A camada k difere da camada posterior por apenas um par de sítios primeiros vizinhos antiparalelos. Neste caso, tentamos inverter os spins deste par “antiferro” com probabilidade $\min\{1, N_a(\sigma_{k+1})/N_a(\sigma_{k-1})\}$, de modo que a camada k fique igual à camada $k + 1$.
4. A camada seguinte ($k + 1$) é idêntica à camada escolhida (k) mas distinta da camada anterior ($k - 1$). A camada k difere da camada anterior por apenas um par de sítios primeiros vizinhos antiparalelos. Neste caso, tentamos inverter os spins deste par “antiferro” com probabilidade $\min\{1, N_a(\sigma_{k-1})/N_a(\sigma_{k+1})\}$, de modo que a camada k fique igual à camada $k - 1$.
5. As três camadas ($k - 1$, k e $k + 1$) são diferentes entre si. A camada escolhida difere da camada anterior e da camada posterior por dois pares distintos de sítios primeiros vizinhos antiparalelos. Neste caso devemos considerar os seguintes sub-casos.
 - 5.1 Os dois pares “antiferros” não formam uma plaqueta de quatro spins, isto é, a posição dos quatro sítios não forma um quadrado. Neste caso invertemos os spins dentro de cada par “antiferro” a menos que os dois pares “antiferro” sejam formados por três sítios alinhados.

5.2 Os dois pares “antiferros” pertencem à mesma plaqueta, isto é, a posição dos quatro spins dos dois pares “antiferro” formam um quadrado. Este caso devemos dividir novamente nos seguintes sub-casos

5.2.1 Os dois pares “antiferros” estão na mesma plaqueta e têm um sítio em comum. Isto é, as ligações entre os sítios que formam os dois pares “antiferros” são perpendiculares. Neste caso, se a soma dos quatro spins pertencentes à plaqueta for nula nós invertemos estes quatro spins. Caso contrário, invertemos apenas o spin do sítio em comum e do seu sítio diagonalmente oposto.

5.2.2 Os dois pares “antiferro” estão na mesma plaqueta mas não têm sítio em comum. Isto é, as ligações entre os sítios que formam os dois pares “antiferro” são paralelas. Neste caso, se os dois spins pertencentes a uma das diagonais da plaqueta têm o mesmo sinal, invertemos os quatro spins da plaqueta. Caso contrário, escolhemos ao acaso uma das diagonais da plaqueta e invertemos somente os spins da diagonal escolhida.

As probabilidades de transição definidas acima obedecem ao princípio do balanceamento detalhado, como pode ser facilmente verificado substituindo-as na expressão 3.7 juntamente com as definições dos elementos da matriz T dada em 5.65. Portanto, a simulação de Monte Carlo irá gerar os estados σ_k de acordo com a probabilidade estacionária 3.5.

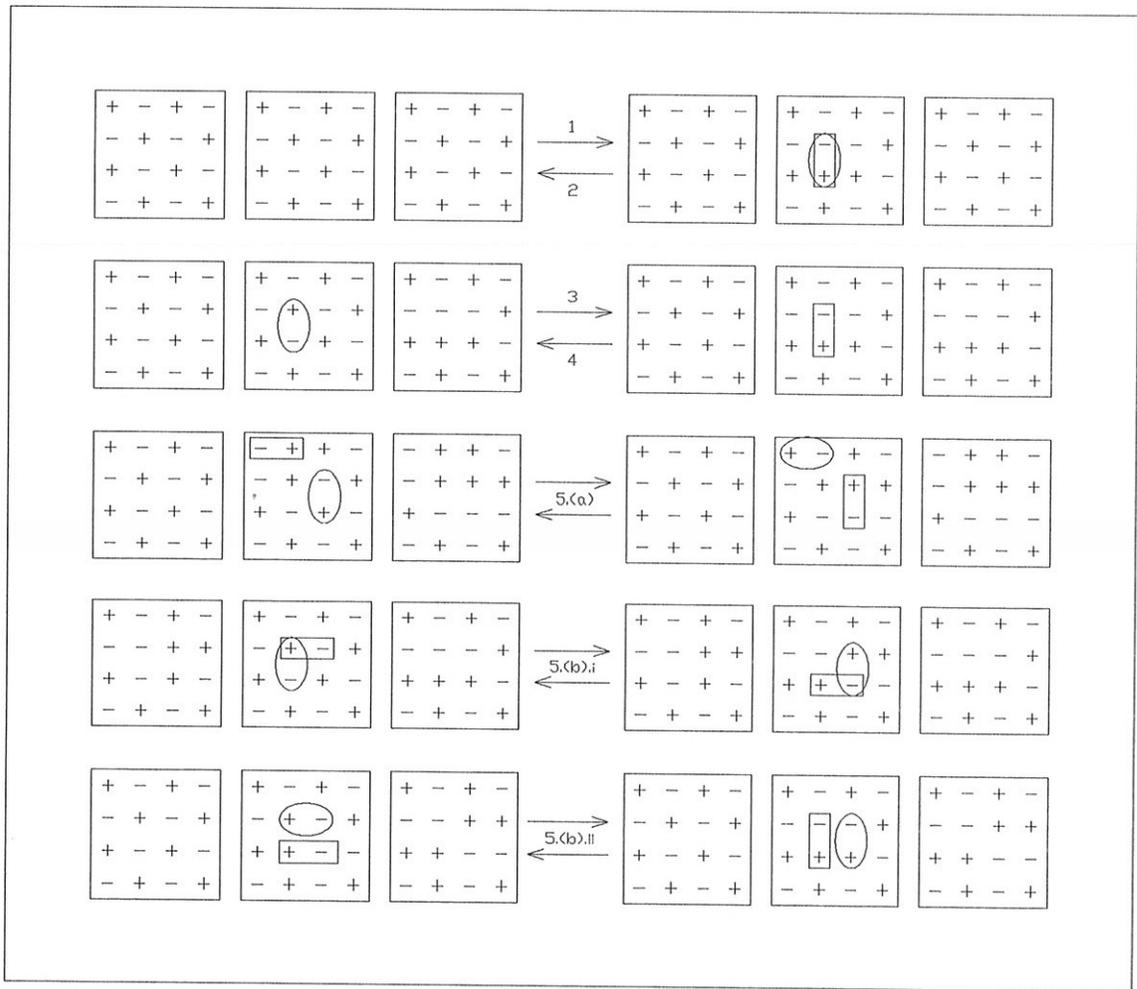


Figura 6-1: Exemplos de mudança de estado do sistema. Em cada grupo de três diagramas quadrados desta figura representamos três camadas do sistema: a camada central a qual se tenta inverter um par “antiferro” e suas camadas anterior e posterior. As setas indicam mudanças de estado da camada central e os números referem-se às possibilidades de transição descritas no texto. O par “antiferro” da camada central distinto da camada anterior é destacado por um retângulo, enquanto a elipse destaca o par “antiferro” distinto da camada posterior.

6.3 Resultados

Usando o algoritmo apresentado na seção anterior, calculamos o maior autovalor dentro de cada um dos blocos $M = 0, 1$ e 2 , para tamanhos de rede $L = 4, 6, 8, 12$ e 16 usando a equação 3.27. A magnetização “staggered” do sistema também é estimada para estes valores de L além de $L = 10$ e $L = 24$. Consideramos redes com um número de camadas K entre 2000 e 4000. A maior parte das simulações foram realizadas com 10^5 a 10^6 passos de Monte Carlo (PMC) onde cada passo PMC significa uma tentativa de mudança de estado por *camada* do sistema. Desta forma, camadas maiores necessitam de um maior número de PMC. O programa foi escrito em FORTRAN e seu código encontra-se no anexo I. Conferimos o nosso método para o caso $L = 4$ através da comparação com os resultados de diagonalização exata de *Tang and Hirsh* [1989].

Na Tabela 6.1 apresentamos a energia do estado fundamental por sítio E_0/L^2 , a energia do primeiro estado excitado E_1/L^2 , e a menor energia do bloco $M = 2$, E_2/L^2 , para valores de $L = 4$ a 16 .

Tabela 6.1: Energia por sítio do estado fundamental E_0/L^2 , energia por sítio do primeiro estado excitado E_1/L^2 , e a menor energia por sítio E_2/L^2 para os estados com $M = 2$, calculadas pelo presente método de Monte Carlo

L	E_0/L^2	E_1/L^2	E_2/L^2
4	-0,7018(3)	-0,6652(3)	-0,5943(2)
6	-0,6783(2)	-0,6704(4)	-0,6539(3)
8	-0,6715(3)	-0,6703(6)	-0,6647(4)
12	-0,6699(3)	-0,6692(4)	-0,6680(8)
16	-0,6700(6)	-0,6681(10)	-0,6677(12)
∞	-0,6690(2)	-0,6690(2)	-0,6690(2)

Na Figura 6-2 apresentamos os gráficos de E_0/L^2 , E_1/L^2 e E_2/L^2 em função de $1/L^3$.
Assumindo o comportamento

$$\frac{E_M}{L^2} = \epsilon + c_M \frac{1}{L^3}, \quad (6.1)$$

onde $M = 0, 1$ e 2 . Através dos ajustes lineares sobre os pontos obtidos nas simulações de Monte Carlo obtivemos o valor extrapolado para redes infinitas da energia do estado fundamental por sítio ϵ e das declividades c_0 , c_1 e c_2 que apresentamos na Tabela 6.2 juntamente com os resultados disponíveis na literatura calculados por métodos de Monte Carlo de temperatura nula distintos do nosso.

Tabela 6.2:

Referência	ϵ	c_0	c_1	c_2
<i>este trabalho</i>	-0,6690(2)	-2,07(2)	-0,22(2)	3,18(7)
[<i>Carlson</i> , 1989]	-0,66918(10)	-2,086		
[<i>Trivedi and Ceperley</i> , 1990]	-0,6692(2)	-2,08(2)		
[<i>Barnes and Kovarik</i> , 1990]	-0,66923(13)	-2.083(8)		

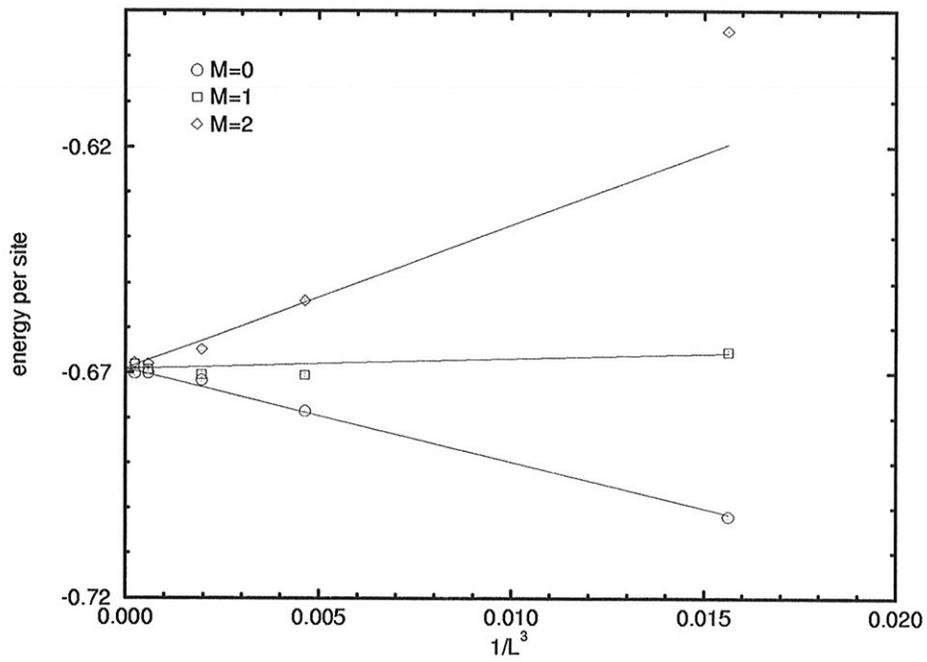


Figura 6-2: Energia do estado fundamental por sítio E_0/L^2 , e as menores energias por sítio E_1/L^2 e E_2/L^2 dos setores $M = 1$ e 2 , respectivamente, em função de $1/L^3$. As retas são ajustes lineares sobre os pontos calculados nas simulações de Monte Carlo.

O parâmetro de ordem para este sistema é a magnetização “staggered” do estado fundamental por sítio definida por

$$\vec{m} = \left\langle \Psi_0 \left| \frac{1}{N} \sum_i \gamma_i \vec{S}_i \right| \Psi_0 \right\rangle, \quad (6.2)$$

onde $\gamma_i = 1$ se o sítio i pertence a uma sub-rede e $\gamma_i = -1$ se pertence à outra. Contudo como redes finitas não podem apresentar quebra espontânea de simetria, este parâmetro de ordem deve se anular de modo que o substituímos pela raiz da magnetização “staggered” quadrada média m^\dagger (“root-mean-squared staggered magnetization”)

$$m^\dagger = \left[\left\langle \Psi_0 \left| \left(\frac{1}{N} \sum_i \gamma_i \vec{S}_i \right)^2 \right| \Psi_0 \right\rangle \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (6.3)$$

Porém o método de Monte Carlo apresentado no capítulo 3 permite o acesso apenas à sua projeção z , dada por

$$m_z^\dagger = \left[\left\langle \Psi_0 \left| \left(\frac{1}{N} \sum_i \gamma_i S_i^z \right)^2 \right| \Psi_0 \right\rangle \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (6.4)$$

No estado fundamental isotrópico de redes finitas esperamos que as três componentes sejam iguais de modo que $m^\dagger = \sqrt{3}m_z^\dagger$. Isto é realmente observado em simulações de redes pequenas de $L = 4, 6$ e 8 . Contudo para valores maiores de L , os resultados de Monte Carlo obtidos a partir da configuração inicial do sistema de magnetização “staggered” máxima, mostram que a isotropia do sistema é quebrada e o sistema apresenta a magnetização “staggered” na direção z . Esta característica é identificada nas Figuras 6-3 e 6-4 onde apresentamos a distribuição de probabilidades $P_L(\mu)$ da variável μ definida por

$$\mu = \frac{1}{N} \sum_i \gamma_i \frac{1}{2} \sigma_i \quad (6.5)$$

para valores de $N = L^2$ com $L = 4, 6, 8, 10, 12, 16$ e 24 .

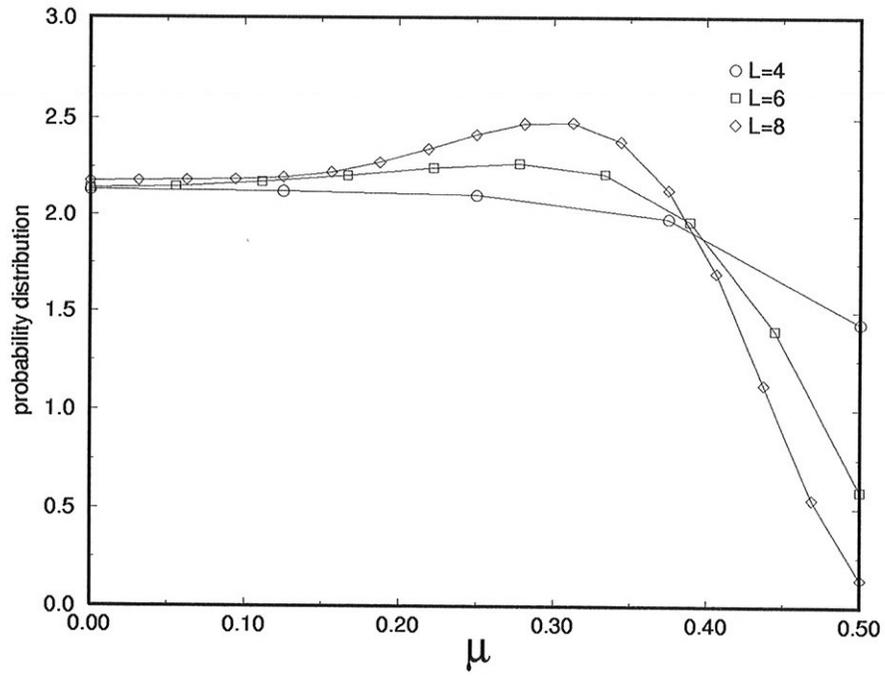


Figura 6-3: Distribuição de probabilidades da componente z da magnetização “staggered” μ para $L = 4, 6$ e 8 .

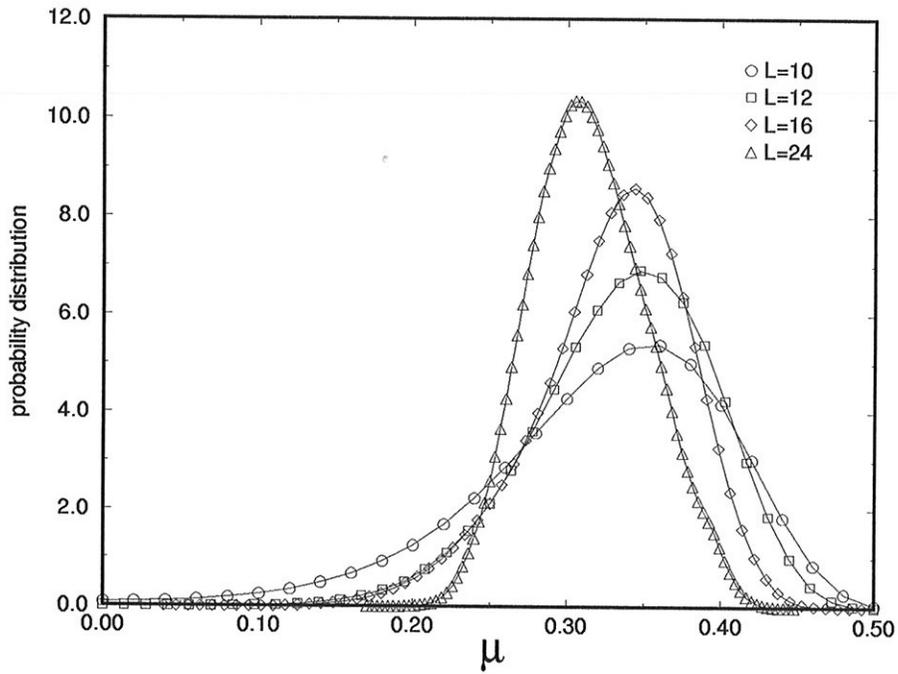


Figura 6-4: Distribuição de probabilidades da componente z da magnetização “staggered” μ para $L = 10, 12, 16$ e 24 .

Na Tabela 6.3 apresentamos os valores de $m_z^* = \sum_{\mu} |\mu| P_L(\mu)$ e $m_z^\dagger = \left| \sum_{\mu} \mu^2 P_L(\mu) \right|^{\frac{1}{2}}$ para vários valores de L . Conforme as distribuições $P_L(\mu)$, para $L = 10, 12, 16$ e 24 , a magnetização “staggered” é identificada com a sua componente z , $m^\dagger = m_z^\dagger$. Para $L = 4, 6, 8$, o sistema é isotrópico e devemos fazer $m^\dagger = \sqrt{3}m_z^\dagger$.

Tabela 6.3: A componente z da magnetização “staggered” m_z^* e m_z^\dagger calculadas para vários valores de L

L	m_z^*	m_z^\dagger
4	0,2587(6)	0,3036(5)
6	0,234(3)	0,274(3)
8	0,261(8)	0,288(6)
10	0,323(4)	0,333(3)
12	0,322(4)	0,328(3)
16	0,318(4)	0,323(4)
24	0,314(6)	0,317(6)
∞	0,307(6)	0,307(6)

Na Figura 6-5 apresentamos os gráficos de m_z^\dagger e m_z^* em função de $1/L$. Assumindo o comportamento $m_z^\dagger = m + a/L$ e $m_z^* = m + b/L$ a extrapolação do valor da magnetização “staggered” para redes infinitas é dada por $m = 0.307(6)$.

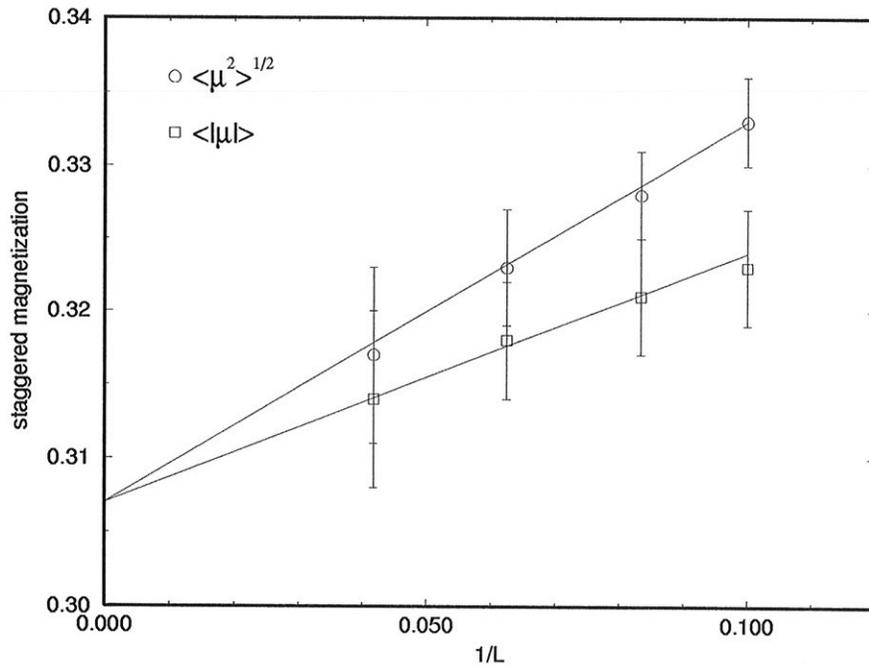


Figura 6-5: Magnetização “staggered” em função de $1/L$. As retas são ajustes lineares sobre os pontos calculados na simulação de Monte Carlo

Capítulo 7

Estado Fundamental do Antiferromagneto de Heisenberg na Rede Cúbica.

7.1 Introdução

Materiais supercondutores como La_2CuO_4 apresentam uma fase ordenada de Néel descrita pelo modelo de Heisenberg quântico de spin-1/2. Geralmente são usados modelos bidimensionais, pois neste sistema os acoplamentos predominantes ocorrem dentro dos planos CuO_2 . Embora a interação interplanar seja muito inferior ao acoplamento intraplano, este último não é nulo [*Chacravarty et al.*, 1989]. Outros materiais quase bidimensionais, como o CuF_2H_2O , podem apresentar acoplamentos interplanares mais intensos [*de Jongh and Miderman*, 1974]. Portanto é interessante investigar o efeito da anisotropia espacial do sistema, notadamente seu efeito sobre o ordenamento do estado fundamental dado pela magnetização “staggered”. Neste capítulo, estudamos o estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg de spin-1/2, definido em uma rede cúbica espacialmente anisotrópica. Se o acoplamento entre os sítios da rede cristalina depende da posição relativa entre dois sítios primeiros vizinhos, devemos reescrever a

hamiltonina de Heisenberg dada em 5.5 na forma

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{r}} \left(J_x \vec{S}_{\vec{r}} \cdot \vec{S}_{\vec{r}+\hat{x}} + J_y \vec{S}_{\vec{r}} \cdot \vec{S}_{\vec{r}+\hat{y}} + J_z \vec{S}_{\vec{r}} \cdot \vec{S}_{\vec{r}+\hat{z}} \right), \quad (7.1)$$

onde \vec{r} é um vetor da rede cúbica de base \hat{x} , \hat{y} , \hat{z} e $\vec{S}_{\vec{r}}$ seu respectivo operador de spin-1/2, conforme definido em 5.7. Os parâmetros positivos J_x , J_y e J_z descrevem a anisotropia do sistema que pode ser de dois tipos.

- (a) *Anisotropia planar*: $J_x = J_y = 1$ e $J_z = \alpha$, onde α é chamado acoplamento interplanar.
- (b) *Anisotropia axial*: $J_x = J_y = \alpha$ e $J_z = 1$, onde α é chamado acoplamento interlinear.

Em ambos os casos o parâmetro α de acoplamento varia no intervalo $0 \leq \alpha \leq 1$ sendo que recuperamos o sistema isotrópico fazendo $\alpha = 1$.

No capítulo anterior vimos que o estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg de spin-1/2 na rede quadrada apresenta ordem de Néel com uma magnetização “staggered” em torno de 60% de seu valor saturado. No caso (a) o acoplamento entre os planos deve favorecer ainda mais o ordenamento do sistema de modo que esperamos que a magnetização “staggered” aumente com o parâmetro α . Uma situação bastante diferente é encontrada no caso (b), pois o estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg de spin-1/2 unidimensional não possui magnetização “staggered”. Além disso, como não há barreira de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, a correlação do estado fundamental do sistema exhibe decaimento algébrico [Luther and Peschel, 1975], de modo que o sistema está sobre um ponto crítico. Logo, esperamos que o acoplamento entre as cadeias de spins leve o sistema a um estado ordenado de Néel. Devemos ressaltar que este comportamento é diferente do caso do sistema de spin-1 no qual o ordenamento depende da intensidade do acoplamento interlinear em relação à barreira de energia [Affleck, 1989], que é diferente de zero para sistemas de spins inteiros [Haldane, 1983].

O problema que tratamos neste capítulo foi recentemente abordado por *Wang et al.* [1992] usando teoria de campo médio de Schwinger-boson. Em ambos os casos, estes autores observam que a magnetização “staggered” do sistema aumenta com α , o que está de acordo com nossos resultados. Contudo, no caso (b), seus resultados mostram que a magnetização “staggered” m^\dagger se anula para $\alpha \leq 0.112$, enquanto nossos resultados indicam que m^\dagger se anula somente para $\alpha = 0$. Por outro lado, nossos resultados estão de acordo com a estimativa de *Sakay and Takahashi* [1989] que obtêm $\alpha_c = 0$ usando ondas de spins na qual fazem aproximação de campo médio no acoplamento interlinear.

As melhores estimativas para a magnetização “staggered” do sistema isotrópico foram obtidas por teoria de ondas de spins [*Nishimori and Miyake*, 1985], [*Oitmaa et al.*, 1994] e expansões em séries [*Oitmaa et al.*, 1994], [*Parrinello and Arai*, 1974]. Até onde sabemos, o presente trabalho faz as primeiras estimativas destas grandezas por método de Monte Carlo. Nosso resultado para a magnetização “staggered” $m^\dagger = 0,429 \pm 0,001$, situa-se pouco abaixo do resultado de *Parrinello and Arai* [1974], $m^\dagger = 0,4321$ e pouco acima do resultado $m^\dagger = 0,424 \pm 0,002$ de *Oitmaa et al.* [1994]. A energia do estado fundamental por sítio que calculamos $\epsilon_o = -0,899 \pm 0,001$ está um pouco abaixo dos resultados $\epsilon_o = -0,9010$ de *Parrinello and Arai* [1974] $\epsilon_o = -0,9021 \pm 0,0002$ de *Oitmaa et al.* [1994].

7.2 O algoritmo

O algoritmo desenvolvido no capítulo anterior para o modelo de Antiferromagneto de Heisenberg de spin-1/2 isotrópico na rede quadrada pode ser facilmente estendido para o presente sistema se, além da dimensão adicional, discriminarmos o acoplamento entre os spins do par “antiferro” segundo a direção de seus sítios constituintes.

O operador \mathcal{T} correspondente à hamiltoniana de Heisenberg espacialmente anisotrópica

é construído de forma análoga ao isotrópico bidimensional dado em 5.62.

$$\mathcal{T} = -2\mathcal{H}' + \frac{1}{2} (J_x N_{p_x} + J_y N_{p_y} + J_z N_{p_z}), \quad (7.2)$$

onde \mathcal{H}' é a hamiltoniana 7.1 submetida à transformação dada em 5.34, ou seja, uma de suas sub-redes é girada de 180° em torno do eixo z . As constantes N_{p_x} , N_{p_y} e N_{p_z} são, respectivamente, os números de pares “antiferro” nas direções \hat{x} , \hat{y} e \hat{z} . Os autovalores E de \mathcal{H}' (e de \mathcal{H}) e λ de \mathcal{T} estão relacionados por,

$$E = -\frac{\lambda}{2} + \frac{1}{4} (J_x N_{p_x} + J_y N_{p_y} + J_z N_{p_z}), \quad (7.3)$$

A matriz T do modelo tridimensional é obtida através das expressões 5.23 e 5.28, mas agora devemos levar em conta a direção do par “antiferro”, isto é, se a ligação entre os spins está na direção \hat{x} , \hat{y} ou \hat{z} . Portanto os elementos de T são dados por

$$T(\tilde{\sigma}, \sigma) = \langle \tilde{\sigma} | T | \sigma \rangle = \begin{cases} J_x N_{a_x}(\sigma) + J_y N_{a_y}(\sigma) + J_z N_{a_z}(\sigma), & \text{se } \sigma = \tilde{\sigma}, \\ J_x, & \text{se } \sigma \neq \tilde{\sigma} \text{ por um par “antiferro” na direção } \hat{x}, \\ J_y, & \text{se } \sigma \neq \tilde{\sigma} \text{ por um par “antiferro” na direção } \hat{y}, \\ J_z, & \text{se } \sigma \neq \tilde{\sigma} \text{ por um par “antiferro” na direção } \hat{z}, \\ 0, & \text{de outro modo.} \end{cases} \quad (7.4)$$

Conforme fizemos no capítulo anterior, devemos construir cópias do sistema para que possamos aplicar o método desenvolvido no capítulo 3. Vamos considerar um sistema de K camadas, onde cada camada é uma rede cúbica com $N = L \times L \times L$ sítios. O sistema total possui $K \times N$ sítios, sendo que cada sítio é definido pela variável $\sigma_{ik} = \pm 1$, onde novamente o índice $k = 1, 2, \dots, K$ refere-se à camada e o índice i define a posição do sítio dentro da respectiva camada. Como vemos a estrutura do algoritmo é exatamente igual à do sistema bidimensional, assim iniciamos o processo com uma configuração total do sistema tal que, para cada camada k do sistema, temos (a) $\sum_i \sigma_{ik} = 2M$ e (b) duas camadas consecutivas são distintas por no máximo um par “antiferro”. O processo de

evolução da rede é feito tentando-se modificar o estado de uma camada por vez de forma que estas duas condições sejam sempre satisfeitas. As probabilidades de transição dos estados de uma camada para a rede cúbica espacialmente anisotrópica pode ser obtida com a generalização do algoritmo visto no capítulo anterior. Porém agora devemos considerar separadamente os tipos de pares “antiferro” envolvidos, se na direção \hat{x} , \hat{y} ou \hat{z} . As probabilidades com que as novas configurações são aceitas devem ser definidas substituindo os valores de $T(\tilde{\sigma}, \sigma)$ dados em 7.4 na equação do balanceamento detalhado dada em 3.7.

7.3 Resultados

Usando o algoritmo apresentado na seção anterior calculamos a energia do estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg na rede cúbica espacialmente anisotrópica. Também calculamos as grandezas relacionadas à magnetização “staggered” do sistema m^\dagger , m_z^\dagger e μ que já foram definidas no capítulo anterior pelas expressões 6.3, 6.4 e 6.5, respectivamente. Todas as simulações foram feitas dentro do bloco $M = 0$. Consideramos sistemas com $K = 2000$ camadas e $L = 4, 6$ e 8 e as simulações foram feitas com 10^6 a 10^7 passos de Monte Carlo (PMC), onde cada PMC significa uma tentativa de mudança de estado por *camada* do sistema.

7.3.1 Sistema Isotrópico

Calculamos as propriedades do estado fundamental isotrópico ($\alpha = 1$) para $L = 4, 6$, e 8 , iniciando a simulação com a configuração de máxima magnetização “staggered”. Os valores $L = 6$ e 8 são suficientemente grandes para a quebra de simetria do estado fundamental e o sistema apresenta uma magnetização “staggered” na direção z , de modo que $m^\dagger = m_z^\dagger$. Para $L = 4$, o estado fundamental do sistema é isotrópico de forma que fazemos $m^\dagger = \sqrt{3}m_z^\dagger$. Estes dois comportamentos podem ser observados na Figura 7-1, onde apresentamos a distribuição de probabilidades $P_L(\mu)$ da variável aleatória μ dada

em 6.5 para $L = 4, 6$ e 8 .

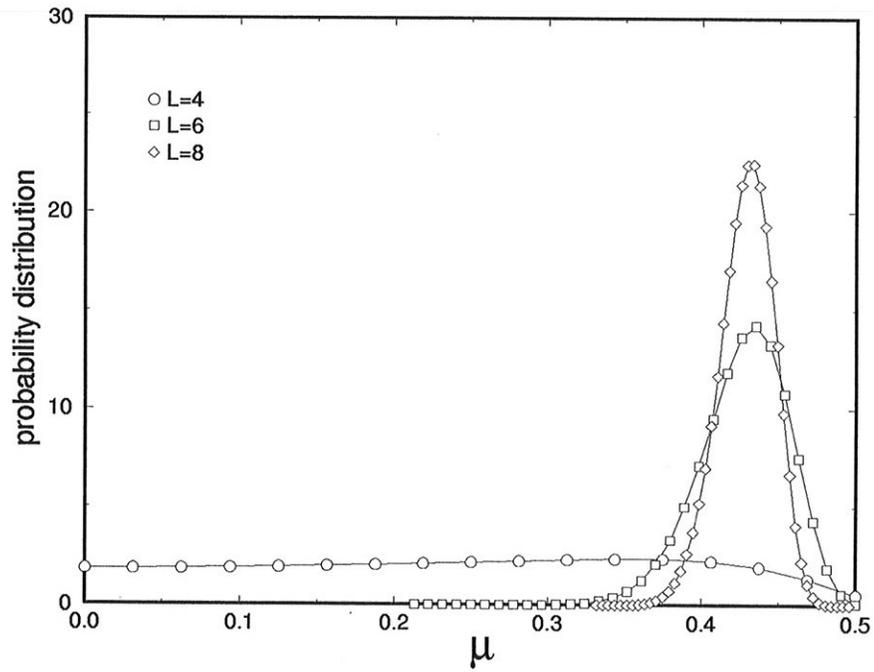


Figura 7-1: Distribuição de Probabilidades da componente z da magnetização "staggered" para rede cúbica isotrópica de lado L , para $L = 4, 6$ e 8 .

Na Tabela 7.1 apresentamos os nossos resultados para a componente z da magnetização “staggered” e a energia do estado fundamental por sítio $\epsilon_0 = E_0/N$ para os valores $L = 4, 6$ e 8 .

Tabela 7.1: Componente z da magnetização “staggered” e a energia do estado fundamental por sítio $\epsilon_0 = E_0/N$ para os valores $L = 4, 6$ e 8

L	m_z^\dagger	ϵ_0
4	0,290(2)	-0,9147(4)
6	0,4283(8)	-0,9021(4)
8	0,4292(5)	-0,9002(7)
∞	0,429(1)	-0,899(1)

7.3.2 Anisotropia Planar

Neste caso o parâmetro α refere-se à intensidade do acoplamento entre os planos em que temos a transição $3D \rightarrow 2D$ de um sistema tridimensional a um sistema (quase) bidimensional. Simulamos sistemas com $L = 4, 6$ e 8 iniciando o processo com a configuração saturada de magnetização “staggered”. Apresentamos na Figura 7-2 o gráfico da magnetização “staggered” m^\dagger em função de α para $L = 6$ e 8 . O tamanho do sistema é suficientemente grande para dispensar correções de redes finitas se o parâmetro α não for tão pequeno. Como mostramos na Figura 7-2 estes resultados são os mesmos, considerados os desvios estatísticos, para $\alpha > 0,2$. Nossos resultados numéricos podem ser comparados com os resultados de teoria de Schwinger-boson obtidos por *Wang et al.* [1992]. Para $\alpha > 0,2$ nossos resultados diferem dos calculados por estes autores por menos de 3%. Contudo, para acoplamentos interplanares pouco intensos as discrepâncias aumentam.

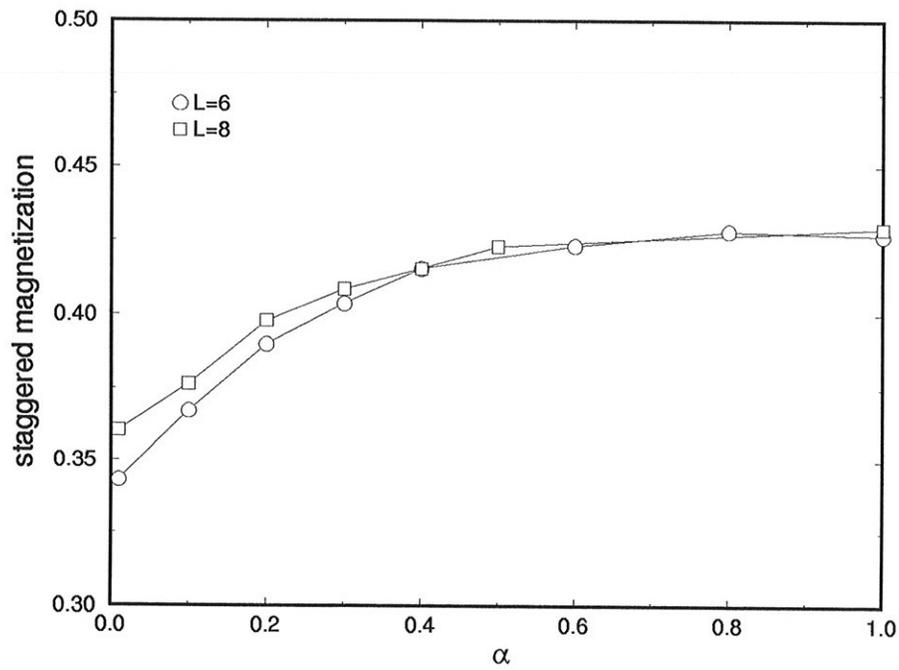


Figura 7-2: Magnetização “staggered” m^\dagger em função da anisotropia interplanar α que correspondente à transição 3D \rightarrow 2D.

Usando a notação m_{2D}^\dagger para a magnetização “staggered” do estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg na rede quadrada e m_+^\dagger para o limite de m^\dagger quando $\alpha \rightarrow 0$, poderíamos nos perguntar se m_+^\dagger possui o mesmo valor de m_{2D}^\dagger . Antes de relacionar estas grandezas devemos observar que a magnetização total de cada camada do sistema é dada por

$$M = \frac{1}{2} \sum_z \sum_{xy} \sigma_{\vec{r}_{xyzk}} \quad (7.5)$$

onde \vec{r}_{xyzk} é a posição de um sítio da rede cúbica de coordenadas x, y e z . Os L planos com acoplamento antiferromagnético intenso são definidos pela cota z . O índice k apenas indica que esta condição deve ser satisfeita pelas K camadas do sistema total. Quando $\alpha = 0$ a restrição sobre a magnetização do sistema $M = 0$ é imposta a cada um dos L planos que formam a rede cúbica, isto é $\sum_{xy} \sigma_{\vec{r}_{xyzk}} = 0$. No entanto para $\alpha > 0$ esta restrição é imposta a toda rede cúbica de modo que a magnetização dentro de cada plano não é mais conservada, logo a grandeza $\sum_{xy} \sigma_{\vec{r}_{xyzk}}$ pode ter qualquer valor no intervalo $-L^2$ e L^2 .

Para $L = 4, 6$ e 8 , calculamos $m_+^\dagger = 0,271(2)$, $m_+^\dagger = 0,343(1)$ e $m_+^\dagger = 0,361(1)$, respectivamente, que podem ser comparados com $m_{2D}^\dagger = 0,526(1)$, $m_{2D}^\dagger = 0,474(5)$ e $m_{2D}^\dagger = 0,340(4)$ que obtivemos no capítulo anterior. Os valores de m_+^\dagger foram realmente calculados com um acoplamento interplanar pequeno dado por $\alpha = 0,01$. Nossos resultados indicam um crescimento de m_+^\dagger com L em contraste com o caso puramente bidimensional em que m_{2D}^\dagger decresce com L . Se o comportamento de m_+^\dagger persistir para valores de L maiores, o valor da extrapolação de nossos resultados para redes infinitas será $m_+^\dagger = 0,373(1)$ que é distinto de nosso resultado para a rede quadrada calculado no capítulo anterior $m_{2D}^\dagger = 0,307(6)$.

Na Figura 7-3 apresentamos a energia do estado fundamental por sítio ϵ_0 em função de α . Os seus valores extrapolados para $\alpha \rightarrow 0$ são $\epsilon_0 = -0,6713(6)$ ($L = 6$) e $\epsilon_0 = -0,6677(4)$ ($L = 8$). Estes dois valores são distintos dos valores correspondentes do sistema bidimensional de mesmo L mas estão bastante próximos do valor $\epsilon_0 = -0,6690(2)$ da rede quadrada infinita, que estimamos no capítulo anterior. Este resultado é esperado,

pois o sistema tridimensional possui muito mais sítios, para um dado L , que o sistema bidimensional.

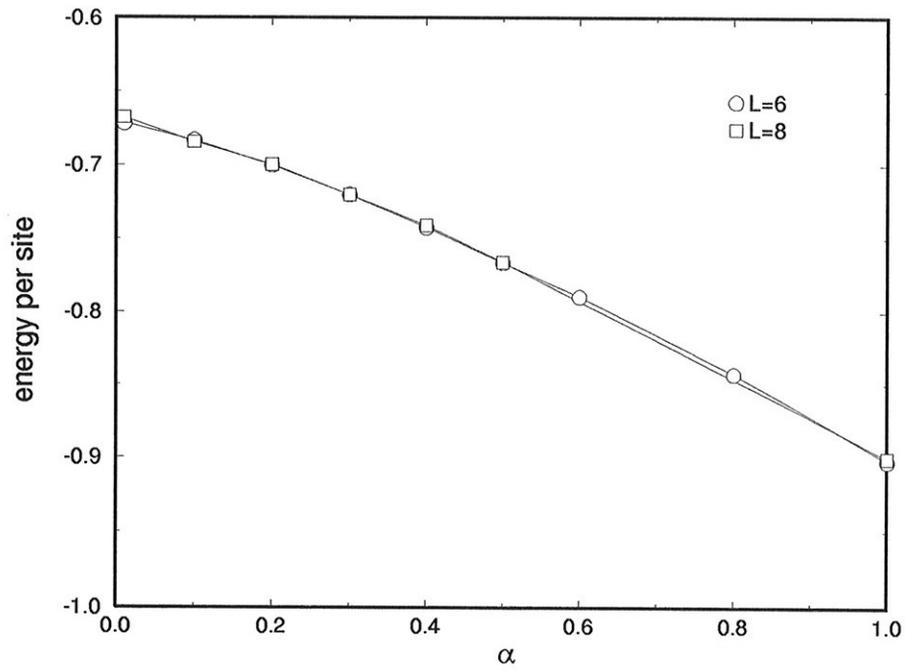


Figura 7-3: Energia do estado fundamental por sítio ϵ_0 em função de α para o caso de acoplamento interplanar correspondente à transição 3D \rightarrow 2D.

7.3.3 Anisotropia Axial

Neste caso o parâmetro α refere-se à intensidade do acoplamento tridimensional entre cadeias de spins, ou seja, temos a transição $3D \rightarrow 1D$. Novamente simulamos sistemas com $L = 4, 6$ e 8 , iniciando o processo no estado de máxima magnetização “staggered”. Na Figura 7-4 apresentamos m^\dagger em função de α . Nossos resultados numéricos estão em concordância, para acoplamentos α intensos, com os obtidos por *Wang et al.* [1992]. Entretanto para valores pequenos de α , estes autores obtêm uma magnetização “staggered” nula para $\alpha \leq 0,112$, enquanto nossos resultados indicam que $m^\dagger > 0$ para $\alpha > 0$ e que $m^\dagger = 0$ apenas quando $\alpha = 0$, ou seja, quando não há mais o acoplamento interlinear.

A curva da magnetização “staggered”, mostrada na Figura 7-4, apresenta um decaimento à medida que α decresce e um ponto de inflexão para determinado valor de α . Os pontos de inflexão ocorrem em valores de α em torno de $0,3, 0,16$ e $0,08$ para $L = 4, 6$ e 8 , respectivamente. Portanto, esperamos que o ponto de inflexão se desloque para a esquerda à medida que L aumente. Este é um indício de que no limite termodinâmico não haverá magnetização “staggered” nula, exceto no ponto $\alpha = 0$. Desta forma, acreditamos que este sistema não exhibe transição de fase para algum valor de α diferente de zero.

Na Figura 7-5 apresentamos o gráfico da energia do estado fundamental por sítio ϵ_0 em função de α . A extrapolação $\alpha \rightarrow 0$, para curva de $L = 8$, resulta em $\epsilon_0 = -0,444(1)$ que deve ser comparado com o valor exato de cadeias infinitas $\epsilon_0 = -\ln(2) + 1/4 = -0,443147\dots$.

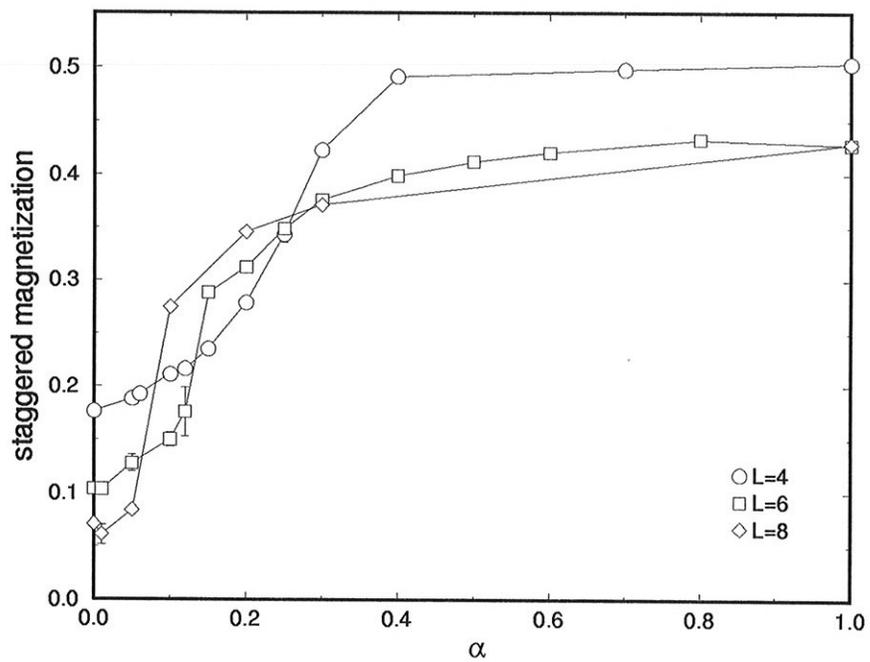


Figura 7-4: Magnetização “staggered” em função de α para o caso de anisotropia interlinear 3D \rightarrow 1D.

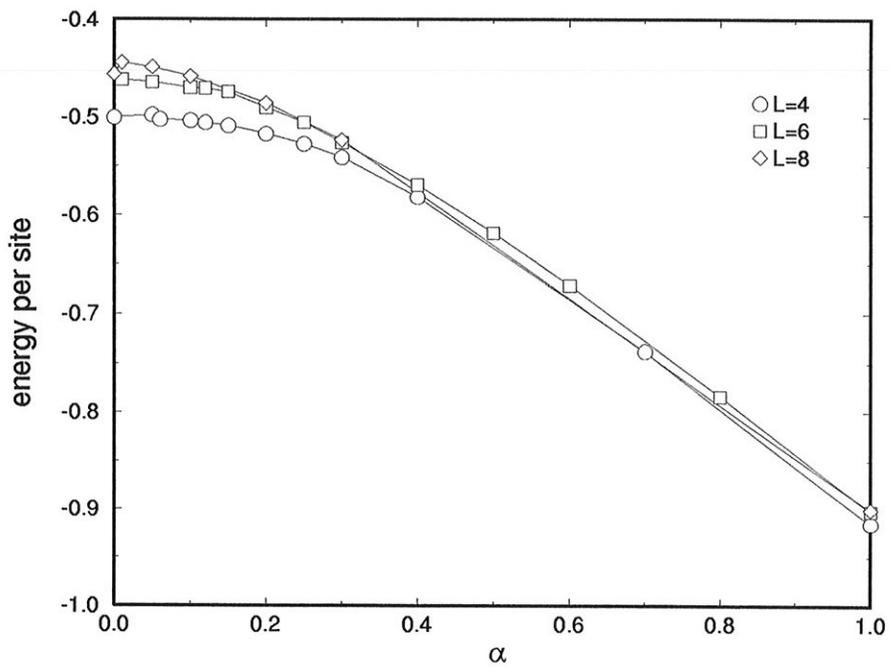


Figura 7-5: Energia do estado fundamental por sítio ϵ_0 em função de α para o caso de anisotropia interlinear 3D \rightarrow 1D

Capítulo 8

Conclusão

Desenvolvemos um novo método de Monte Carlo para a estimativa do maior autovalor de uma matriz de elementos não negativos. Este método pode ser visto como um novo método de Monte Carlo de temperatura nula para sistemas quânticos e também como um novo algoritmo para a estimativa direta da entropia de sistemas de spins clássicos.

Calculamos as propriedades do estado fundamental do modelo de Heisenberg antiferromagnético quântico de spin-1/2 na rede quadrada usando este novo método. As energias do estado fundamental por sítio ϵ_0 e a magnetização “staggered” m^\dagger foram obtidas em redes de até 24×24 sítios. A extrapolação de nossos resultados para o caso de rede infinita $\epsilon_0 = -0,6690 \pm 0,0002$ e $m^\dagger = 0,307 \pm 0,006$ estão em boa concordância com os resultados obtidos através de outros métodos de Monte Carlo de temperatura nula.

Os bons resultados obtidos em redes relativamente grandes estimularam a aplicação deste método no antiferromagneto de Heisenberg de spin-1/2 na rede cúbica espacialmente anisotrópica. Até onde sabemos, este é o primeiro estudo usando métodos de Monte Carlo deste sistema. Analisamos os casos de acoplamentos interplanares, transição $3D \rightarrow 2D$, e acoplamentos interlineares, transição $3D \rightarrow 1D$. Em ambos os casos observamos que a magnetização “staggered” m^\dagger cresce com o parâmetro de anisotropia α e que m^\dagger é diferente de zero exceto no caso estritamente unidimensional.

Em outra aplicação do método, estudamos a entropia dos antiferromagneto de Ising na presença de um campo magnético externo nas redes triangular e cúbica de face centrada. A entropia destes sistemas foi calculada diretamente em cada simulação de Monte Carlo para valores de temperatura e campo externo fixos. Os resultados obtidos estão em concordância com os resultados exatos e com estimativas de outras simulações de Monte Carlo.

O método que desenvolvemos possui características gerais que permitem que seja aplicado em qualquer sistema físico que possa ser escrito na forma de uma equação de autovalores com matriz de elementos não negativos. Essencialmente levamos a estes problemas a capacidade de soluções do tipo Monte Carlo, ou seja, a estimativa de suas propriedades dominantes em sistemas finitos de muitos graus de liberdade. Em particular, vimos que pode ser aplicado com sucesso em sistemas antiferromagnéticos quânticos em redes bi-partidas e na determinação direta da entropia de sistemas de spins de Ising antiferromagnéticos frustrados. Este trabalho de maneira alguma esgota o domínio de aplicação do método desenvolvido. Mesmo em sistemas quânticos onde o número de operadores de matrizes positivas é reduzido, temos outros problemas de interesse como o próprio modelo de Heisenberg anisotrópico ou o caso correspondente de spin-1. As possibilidades de aplicação do método em sistemas de Ising são quase ilimitadas, pois são muitos os sistemas em que se pode definir a matriz de transferência.

Referências

- I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **62** (1989), 474.
- Neil W. Ashcroft and N. David Mermin, *Solid State Physics*, Saunders, Philadelphia, PA, 1988.
- T. Barnes, *The 2D Heisenberg antiferromagnet in high- T_c superconductivity*, Int. J. Mod. Phys. C **2** (1991), 659.
- T. Barnes and D. M. Kovarik, Phys. Rev. B (1990), 6159.
- R. J. Baxter, J. Phys. A **13** (1980), L61.
- C. Bichara, J.-P. Gaspard, and J.-C. Mathieu, *Configurational density of states and entropy of alloys: A Monte Carlo approach on body-centered and face-centered cubic lattices*, J. Chem. Phys. **89** (1988), 4339.
- K. Binder, Physica **62** (1972), 508.
- K. Binder, *Monte Carlo study of entropy for face-centered cubic Ising antiferromagnets*, Z. Phys. B **45** (1981), 61.
- K. Binder, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, second ed., Topics in Current Physics, vol. 7, Springer, Berlin, 1986.
- K. Binder and D.W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics (an Introduction)*, Solid-State Sciences, vol. 80, Springer, Berlin, 1988.
- J. Carlson, Phys. Rev. B **40** (1989), 846.
- W. J. Caspers, *Spin Systems*, World Scientific, New Jersey, 1989.
- S. Chacravarty, B. J. Halperin, and D. R. Nelson, Phys. Rev. B **39** (1989), 2344.
- Kuan Ken Chin and D. P. Landau, *Monte Carlo study of a triangular Ising lattice-gas model with two-body and three-body interactions*, Phys. Rev. B **36** (1987), 275.
- E. Dagotto and A. Moreo, *Exact diagonalization study of the frustrated Heisenberg model*, Phys. Rev. B (1989), 4744.
- L. J. de Jongh and A. R. Midiema, *Experiments on Simple Magnetic Model Systems*, Taylor and Francis, London, 1974.
- Mário J. de Oliveira, *The chemical potential as an ensemble average*, Phys. Lett. **91A**

- (1982), 234.
- M. J. de Oliveira, *Ground-state properties of spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg chain Monte Carlo method*, Phys. Rev. B **48** (1993), 6141.
- A. Finel and F. Ducastelle, *On the phase diagram of the fcc Ising model with antiferromagnetic first-neighbour interactions*, Europhys. Lett. **1** (1986), 135.
- R. Friedberg and J. E. Cameron, J. Chem. Phys. **52** (1970), 6049.
- F. R. Gantmacher, *Theory of Matrices*, Chelsea Publishing, 1960.
- B. Gnedenko, *The Theory of Probability*, Mir, Moscow, 1988.
- Mark Gross, Eduardo Sánchez-Velasco, and Eric Siggia, *Ground-state properties of the two-dimensional antiferromagnetic Heisenberg model*, Phys. Rev. B **39** (1989), 2484.
- F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50** (1983), 1153.
- J.M. Hammersley and D.C. Handscomb, *Monte Carlo Methods*, Chapman and Hall, London, 1979.
- Kerson Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley, New York, 1987.
- David A. Huse and Veit Elser, *Simple variational wave functions for two-dimensional Heisenberg spin-1/2 antiferromagnets*, Phys. Rev. Lett. **60** (1988), 2531.
- John G. Kemeny and J. Laurie Snell, *Finite Markov Chains*, D. Van Nostrand, Princeton, New Jersey, 1969.
- D. P. Landau, Phys. Rev. B **13** (1976), 2997.
- Joel L. Lebowitz, Mohan K. Phani, and Daniel F. Styer, *Phase diagram of Cu - Au type alloys*, J. Stat. Phys. **38** (1985), 413.
- S. Liang and P. W. Anderson, *Some new variational resonating-valence-bond-type wave functions for the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a square lattice*, Phys. Rev. Lett. **61** (1988), 365.
- Elliott Lieb and Daniel Mattis, *Ordering energy level of interacting spin systems*, J. Math. Phys. **3** (1962), 749.
- S. H. Lim, M. Hasebe, G. E. Murch, and W. A. Oates, *Thermodynamic properties of binary alloys from Monte Carlo simulations*, Philos. Mag. B **62** (1990), 173.

- S. H. Lim, G. E. Murch, and W. A. Oates, *Direct evaluation of chemical potentials in substitutional solid solutions from Monte Carlo simulations*, Philos. Mag. B **62** (1990), 159.
- H. Q. Lin, *Exact diagonalization of quantum-spin models*, Phys. Rev. B (1990), 6561.
- A. Luther and I. Peschel, Phys. Rev. B **12** (1975), 3908.
- Shang-Keng Ma, *Calculation of entropy from data of motion*, J. Stat. Phys. **26** (1981), 221.
- W. Marshall, Proc. Roy. Soc **A232** (1955), 48.
- Daniel C. Mattis, *The Theory of Magnetism I*, Solid-State Sciences, vol. 17, Springer, Berlin, 1981.
- Hagai Meirovitch, *Calculation of entropy with computer simulation methods*, Chem. Phys. Lett. **45** (1977), 389.
- Hagai Meirovitch, *A Monte Carlo study of the entropy, the pressure, and the critical behavior of the hard-square lattice gas*, J. Stat. Phys. **30** (1983), 681.
- Hagai Meirovitch, *Computer simulation study of hysteresis and free energy in the fcc Ising antiferromagnet*, Phys. Rev. B **30** (1984), 2866.
- Efstathios Menousakis, *The spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides*, Rev. Mod. Phys. **63** (1991), 1.
- B. D. Metcalf, *Phase diagram of a nearest neighbor triangular antiferromagnet in an external field*, Phys. Lett. **45A** (1973), 1.
- N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. **21** (1953), 1087.
- Hidetoshi Nishimori and Satoru J. Miyake, *Ground-state energy of the Heisenberg model with XY-like anisotropy*, Prog. Theor. Phys. **73** (1985), 18.
- W. A. Oates, G. E. Murch, and S. H. Lim, *A test-site method for the evaluation of the lattice-gas pressure in Monte Carlo simulations*, Philos. Mag. B **61** (1990), 337.
- J. Oitmaa and D. D. Betts, *The ground state of two quantum models of magnetism*, Can. J. Phys. **56** (1978), 897.

- J. Oitmaa, C. J. Hamer, and Z. Weihong, *Phys. Rev. B* **50** (1994), 3877.
- L. Onsager, *Phys. Rev.* **65** (1944), 117.
- C. Y. Pan, *Ground-state energy of the spin-1/2 two-dimensional antiferromagnetic Heisenberg model*, *Int. J. Mod. Phys. B* **3** (1989), 1443.
- M. Parrinello and T. Arai, *Phys. Rev. B* **48** (1974), 6141.
- Thomas L. Polgreen, *Monte Carlo simulation of the antiferromagnetic Ising model*, *Phys. Rev. B* **29** (1984), 1468.
- William H. Press and Saul A. Teukolsky, *Numerical Recipes in Fortran: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, New York, 1992.
- Katsuhiko Sakai, *A very fast shift-register sequence random number generator*, *J. Comput. Phys.* **40** (1981), 517.
- T. Sakay and M. Takahashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58** (1989), 3131.
- R. A. Sauerwein and M. J. de Oliveira, *Ground-state properties of spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a square lattice by Monte Carlo method*, *Phys. Rev. B* **49** (1994), 5983.
- R. A. Sauerwein and M. J. de Oliveira, *Entropy of spin models by Monte Carlo*, *Phys. Rev. B* **52** (1995), 3060.
- R. A. Sauerwein and M. J. de Oliveira, *Ground-state properties of spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a cubic lattice by Monte Carlo method*, *Mod. Phys. Lett. B* **9** (1995), 619.
- M. Schick, J. S. Walker, and M. Mortis, *Phys. Rev. B* **16** (1977), 2205.
- Daniel F. Styer, *A first-order phase transition in the face-centered-cubic Ising antiferromagnet*, *Phys. Rev. B* **32** (1985), 393.
- Sanyee Tang and J. E. Hirsh, *Long-range order without broken symmetry: Two-dimensional Heisenberg antiferromagnet at zero temperature*, *Phys. Rev. B* **39** (1989), 4548.
- C. J. Thompson, *Classical Equilibrium Statistical Mechanics*, Clarendon, 1981.
- Nandini Trivedi and D. M. Ceperley, *Green-function Monte Carlo study of quantum*

- antiferromagnets*, Phys. Rev. B **40** (1989), 2737.
- Nandini Trivedi and D. M. Ceperley, *Ground-state correlations of quantum antiferromagnets: a Green-function Monte Carlo study*, Phys. Rev. B **41** (1990), 4552.
- Y.-J. Wang, M.-R. Li, and C.-D. Cong, Phys. Rev. B **46** (1992), 12034.
- G. H. Wannier, *Antiferromagnetism. the triangular Ising net*, Phys. Rev. **79** (1950), 357.
- G. H. Wannier, *Errata*, Phys. Rev. B. **7** (1973), 5017.
- B. Widom, *Some topics in the theory of fluids*, J. Chem. Phys. **39** (1963), 2808.

Anexo I



*****programa heibid13*****

* calculo da energia do estado fundamental do modelo de heisenberg
* utilizando a tecnica de determinacao do maior autovalor de uma
* matriz atraves do metodo de monte carlo.

*

*este programa trabalha ja' em duas sub-redes,
*devemos trocar o sinal dos estados de spin de acordo com a regra:
* lat(i,j,k) --> -lat(i,j,k) se (i+j) for impar.

*****VARAIVEIS INTERNAS*****

*lat(i,j,k) = rede cubica total / cada camada do sistema e dada por k.
*nafi(k) = numero de pares antiferro na direcao i da camada k.
*nafj(k) = numero de pares antiferro na direcao j da camada k.
*mz(k) = componente z da magnetizacao staggered da camada k
*ipoin(k) = coordenada i do par antiferro de k distinto de k+1.
*jpoin(k) = coordenada j do par antiferro de k distinto de k+1.
* se ipoin(k) > 0 => par antiferro de k distinto de k+1 tem direcao i.
* se ipoin(k) < 0 => par antiferro de k distinto de k+1 tem direcao j.

*****Parametros de Entrada*****

*nlin e ncol = dao a dimensao de cada camada, redes quadrada => nlin=ncol.
*nniv = o numero de camadas.
*nt = numero de PMC jogados fora p/ equilibrio.
*ntom = numero de PMC usado em cada media de Monte Carlo.
*nmed = numero de medidas de Monte Carlo.
*issed = semente do gerador de numeros aleatorios.

```

*****Saidas do Programa*****
* As saidas sao escritas em dois arquivos nome1 e nome2.
*
* nome1 contem 6 colunas que apresentam respectivamente as medias de M.C.
* <t>, <delta>, <autovalor dominante da matriz T>=<lambda>,
* <|M|> e <M**2> e <energia do estado fundamental>.
*
* nome2 apresenta histogramas de mz.
*
* Obs. Os ultimos valores escritos em ambos arquivos sao as medias de
* de todos os anteriores.
*****

```

```

    implicit integer*4 (i-n)
    dimension saida(7),ifreq(0:576),ifreq2(0:576)
    character*50 fm
    character*30 nome1
    character*30 nome2
    common/all/lat(22,22,2100),nafi(2100),nafj(2100),naft(2100),
+           mz(2100),ia(22),ip(22),ipp(22),ja(22),jp(22),
+           jpp(22),ka(2100),kp(2100),ipoin(2100),jpoin(2100)
    common/soma/soma(7),soma2(7)

```

```

* definicao de q1

```

```

    q1=0
    q2=(1.+q1)/2.

```

```

* definicao de formato de saida

```

```

fm='(6(f12.6,1x))'

write(*,*) 'entre com nome do arquivo das medidas '
read(*,'(a)') nome1
write(*,*) 'entre com nome do arquivo do histograma '
read(*,'(a)') nome2

write(*,*) 'entre com nlin, ncol, nniv, nt, ntom, nmed, iseed'
read(*,*) nlin,ncol,nniv,nt,ntom,nmed,iseed
nf=nt+ntom*nmed

open(6,file=(nome1),status='new')
open(7,file=(nome2),status='new')
write(7,5)
5  format(43h - heibid13 (MAG=0) - 22 de marco de 1993 -,/)
write(7,10) nlin,ncol,nniv,nt,ntom,nmed,iseed
write(7,6)
6  format(39h - nmed(<v|Mz+|v>) - last data: media -, /)

write(6,5)
write(6,10) nlin,ncol,nniv,nt,ntom,nmed,iseed
10 format(36h nlin ncol nniv nt ntom nmed iseed: ,2(i2,1x),i4,1x,
+      2(i6,1x),i3,1x,i9,/)

* aquecimento do gerador de numeros aleatorios

call heatrand(iseed)

* condicoes de contorno

```

```
do i=1,nlin
  ia(i)=i-1
  ip(i)=i+1
enddo
ia(1)=nlin
ip(nlin)=1
```

```
do i=1,nlin
  ipp(i)=ip(ip(i))
enddo
```

```
do j=1,ncol
  ja(j)=j-1
  jp(j)=j+1
enddo
ja(1)=ncol
jp(ncol)=1
```

```
do j=1,ncol
  jpp(j)=jp(jp(j))
enddo
```

```
do k=1,nniv
  ka(k)=k-1
  kp(k)=k+1
enddo
ka(1)=nniv
kp(nniv)=1
```

* inicializacao da rede

```
do k=1,mniv
  do j=1,ncol
    do i=1,nlin
      lat(i,j,k)=1
    enddo
  enddo
  nafi(k)=ncol*nlin
  nafj(k)=ncol*nlin
  naft(k)=2*ncol*nlin
  mz(k)=ncol*nlin
  ipoin(k)=0
  jpoin(k)=0
enddo
```

* inicializando acumulador do histograma

```
do m=0,nlin*ncol
  ifreq(m)=0
enddo
```

=====inicio do programa=====

* inicializando acumuladores de cada medida

```
s1=.0 !para medida de <t>
s2=.0 !para medida de <delta(s',s)>
s4=.0 !para medida de <v||mz||v>
s5=.0 !para medida de <v|mz**2|v>
```

* inicializando acumulador do histograma parcial

```
do m=0,nlin*ncol
  ifreq2(m)=0
enddo
```

```
icont=0
```

```
kmed=0
```

*-----inicio de cada medida de monte carlo-----

```
do mcont=1,nf
```

* algoritmo de metropolis para cada sitio

```
do lcont=1,nniv
```

```
  k=int(nniv*rand()+1
```

```
  if(ipoin(k).eq.0) then
```

```
    if(ipoin(ka(k)).eq.0) then
```

```
      prob=1./float(naft(k))
```

```
      if(rand().lt.prob) then
```

```
        if(int(naft(k)*rand()).lt.nafi(k)) then
```

```
30          j=int(ncol*rand()+1
```

```
          i=int(nlin*rand()+1
```

```
          if(lat(i,j,k).ne.lat(ip(i),j,k)) go to 30
```

```
          call fliplin(i,j,k)
```

```
!FLIP +1
```

```
          ipoin(k)=i
```

```
          jpoin(k)=j
```

```

        ipoin(ka(k))=i
        jpoin(ka(k))=j
    else
40         j=int(ncol*rand()+1
            i=int(nlin*rand()+1
            if(lat(i,j,k).ne.lat(i,jp(j),k)) go to 40
            call flipcol(i,j,k)                                !FLIP +2
            ipoin(k)=-i
            jpoin(k)=-j
            ipoin(ka(k))=-i
            jpoin(ka(k))=-j
        endif
    endif
else
    prob=float(naft(ka(k)))/float(naft(kp(k)))
    if(rand()).le.prob) then
        i=ipoin(ka(k))
        j=jpoin(ka(k))
        if(i.gt.0) then
            call fliplin(i,j,k)                                !FLIP +3
            ipoin(k)=i
            jpoin(k)=j
            ipoin(ka(k))=0
            jpoin(ka(k))=0
        else
            call flipcol(-i,-j,k)                                !FLIP +4
            ipoin(k)=i
            jpoin(k)=j
            ipoin(ka(k))=0
            jpoin(ka(k))=0
        endif
    endif
endif

```

```

        endif
    endif
endif
else
    if(ipoin(ka(k)).eq.0) then
        prob=float(naft(kp(k)))/float(naft(ka(k)))
        if(rand().le.prob) then
            i=ipoin(k)
            j=jpoin(k)
            if(i.gt.0) then
                call fliplin(i,j,k)                !FLIP -3
                ipoin(k)=0
                jpoin(k)=0
                ipoin(ka(k))=i
                jpoin(ka(k))=j
            else
                call flipcol(-i,-j,k)            !FLIP -4
                ipoin(k)=0
                jpoin(k)=0
                ipoin(ka(k))=i
                jpoin(ka(k))=j
            endif
        endif
    endif
else
    +
    if(ipoin(ka(k)).eq.ipoin(k).and.
        jpoin(ka(k)).eq.jpoin(k)) then
        if(ipoin(k).gt.0) then
            call fliplin(ipoin(k),jpoin(k),k)    !FLIP -1
            ipoin(k)=0
            jpoin(k)=0
        endif
    endif
endif

```

```

    ipoin(ka(k))=0
    jpoin(ka(k))=0
else
    call flipcol(-ipoin(k),-jpoin(k),k)           !FLIP -2
    ipoin(k)=0
    jpoin(k)=0
    ipoin(ka(k))=0
    jpoin(ka(k))=0
endif
else
    iu=ipoin(k)
    ju=jpoin(k)
    id=ipoin(ka(k))
    jd=jpoin(ka(k))
    if(iu.gt.0.and.id.gt.0) then
        if(ju.eq.ja(jd).and.iu.eq.id) then
            if(lat(iu,ju,k).eq.lat(ip(iu),jp(ju),k)) then
                call fliplin(iu,ju,k)
                call fliplin(id,jd,k)           !FLIP +/-5
                ipoin(ka(k))=iu
                jpoin(ka(k))=ju
                ipoin(k)=id
                jpoin(k)=jd
            else
                prob=rand()
                if(prob.lt.q1) then
                    call fliplin(iu,ju,k)           !FLIP +/-5
                    call fliplin(id,jd,k)
                    ipoin(ka(k))=iu
                    jpoin(ka(k))=ju
                
```

```

        ipoin(k)=id
        jpoin(k)=jd
elseif(prob.lt.q2) then
    call flipdia1(iu,ju,k)                !FLIP 16
    ipoin(ka(k))=-iu
    jpoin(ka(k))=-ju
    ipoin(k)=-ip(iu)
    jpoin(k)=-ju
else
    call flipdia2(iu,jp(ju),k)           !FLIP 17
    ipoin(ka(k))=-ip(iu)
    jpoin(ka(k))=-ju
    ipoin(k)=-iu
    jpoin(k)=-ju
endif
endif
elseif(jd.eq.ja(ju).and.iu.eq.id) then
    if(lat(id,jd,k).eq.lat(ip(id),jp(jd),k)) then
        call fliplin(iu,ju,k)
        call fliplin(id,jd,k)           !FLIP +/-5
        ipoin(ka(k))=iu
        jpoin(ka(k))=ju
        ipoin(k)=id
        jpoin(k)=jd
    else
        prob=rand()
        if(prob.lt.q1) then
            call fliplin(iu,ju,k)       !FLIP +/-5
            call fliplin(id,jd,k)
            ipoin(ka(k))=iu

```

```

        jpoin(ka(k))=ju
        ipoin(k)=id
        jpoin(k)=jd
elseif(prob.lt.q2) then
        call flipdia1(id,jd,k)                !FLIP 18
        ipoin(ka(k))=-ip(id)
        jpoin(ka(k))=-jd
        ipoin(k)=-id
        jpoin(k)=-jd
else
        call flipdia2(id,jp(jd),k)           !FLIP 19
        ipoin(k)=-ip(id)
        jpoin(k)=-jd
        ipoin(ka(k))=-id
        jpoin(ka(k))=-jd
endif
endif
elseif(ju.ne.jd.or.
+      (iu.ne.ip(id).and.id.ne.ip(iu))) then
        call fliplin(iu,ju,k)
        call fliplin(id,jd,k)                !FLIP +/-5
        ipoin(ka(k))=iu
        jpoin(ka(k))=ju
        ipoin(k)=id
        jpoin(k)=jd
endif
elseif(iu.lt.0.and.id.lt.0) then
        if(-iu.eq.ia(-id).and.ju.eq.jd) then
                if(lat(-iu,-ju,k).eq.lat(ip(-iu),jp(-ju),k)) then
                        call flipcol(-iu,-ju,k)

```

```

call flipcol(-id,-jd,k)                !FLIP +/-6
ipoin(ka(k))=iu
jpoин(ka(k))=ju
ipoin(k)=id
jpoин(k)=jd
else
  prob=rand()
  if(prob.lt.q1) then
    call flipcol(-iu,-ju,k)            !FLIP +/-6
    call flipcol(-id,-jd,k)
    ipoin(ka(k))=iu
    jpoин(ka(k))=ju
    ipoin(k)=id
    jpoин(k)=jd
  elseif(prob.lt.q2) then
    call flipdia1(-iu,-ju,k)           !FLIP -18
    ipoin(ka(k))=-iu
    jpoин(ka(K))=-ju
    ipoin(k)=-iu
    jpoин(k)=jp(-ju)
  else
    call flipdia2(-iu,jp(-ju),k)       !FLIP -16
    ipoin(ka(k))=-iu
    jpoин(ka(K))=jp(-ju)
    ipoin(k)=-iu
    jpoин(k)=-ju
  endif
endif
elseif(-id.eq.ia(-iu).and.ju.eq.jd) then
  if(lat(-id,-jd,k).eq.lat(ip(-id),jp(-jd),k)) then

```

```

call flipcol(-iu,-ju,k)
call flipcol(-id,-jd,k)                                !FLIP +/-6
ipoin(ka(k))=iu
jpoim(ka(k))=ju
ipoin(k)=id
jpoim(k)=jd
else
  prob=rand()
  if(prob.lt.q1) then
    call flipcol(-iu,-ju,k)                                !FLIP +/-6
    call flipcol(-id,-jd,k)
    ipoin(ka(k))=iu
    jpoim(ka(k))=ju
    ipoin(k)=id
    jpoim(k)=jd
  elseif(prob.lt.q2) then
    call flipdia1(-id,-jd,k)                                !FLIP -17
    ipoin(ka(k))=-id
    jpoim(ka(K))=jp(-jd)
    ipoin(k)=-id
    jpoim(k)=-jd
  else
    call flipdia2(-id,jp(-jd),k)                            !FLIP -19
    ipoin(ka(k))=-id
    jpoim(ka(K))=-jd
    ipoin(k)=-id
    jpoim(k)=jp(-jd)
  endif
endif
elseif(iu.ne.id.or.

```

```

+      (-ju.ne.jp(-jd).and.-jd.ne.jp(-ju)) then
      call flipcol(-iu,-ju,k)
      call flipcol(-id,-jd,k)          !FLIP +/-6
      ipoin(ka(k))=iu
      jpoin(ka(k))=ju
      ipoin(k)=id
      jpoin(k)=jd
    endif
  else
    if(iu.gt.0) then
      if(.not.((-jd.eq.ja(ju).or.-jd.eq.ju).and.
+      (-id.eq.iu.or.-id.eq.ip(iu)))) then
      call fliplin(iu,ju,k)
      call flipcol(-id,-jd,k)          !FLIP +7
      ipoin(ka(k))=iu
      jpoin(ka(k))=ju
      ipoin(k)=id
      jpoin(k)=jd
    else if(iu.eq.-id.and.ju.eq.-jd) then
      if(lat(iu,ju,k).eq.lat(ip(iu),jp(ju),k)) then
      call fliplin(iu,ju,k)
      call fliplin(iu,jp(ju),k)        !FLIP +8
      jpoin(k)=jp(ju)
      ipoin(ka(k))=-ip(-id)
    else
      call flipdia1(iu,ju,k)          !FLIP +9
      ipoin(ka(k))=iu
      jpoin(ka(k))=jp(ju)
      ipoin(k)=-ip(-id)
      jpoin(k)=jd
    endif
  endif

```

```

endif
else if (ip(iu).eq.-id.and.ja(ju).eq.-jd) then
  if(lat(ip(iu),ju,k).eq.lat(iu,ja(ju),k)) then
    call fliplin(iu,ju,k)
    call fliplin(iu,ja(ju),k)          !FLIP -8
    jpoin(k)=ja(ju)
    ipoin(ka(k))=-ia(-id)
  else
    call flipdia1(iu,ja(ju),k)       !FLIP +10
    ipoin(ka(k))=iu
    jpoin(ka(k))=ja(ju)
    ipoin(k)=-ia(-id)
    jpoin(k)=jd
  endif
else if(iu.eq.-id.and.ju.eq.jp(-jd)) then
  if(lat(iu,ju,k).eq.lat(ip(iu),ja(ju),k)) then
    call fliplin(iu,ju,k)
    call fliplin(iu,ja(ju),k)       !FLIP +11
    ipoin(ka(k))=-ip(-id)
    jpoin(k)=ja(ju)
  else
    call flipdia2(iu,ju,k)         !FLIP +12
    ipoin(ka(k))=iu
    jpoin(ka(k))=ja(ju)
    ipoin(k)=-ip(-id)
    jpoin(k)=jd
  endif
else if(ip(iu).eq.-id.and.ju.eq.-jd) then
  if(lat(ip(iu),ju,k).eq.lat(iu,jp(ju),k)) then
    call fliplin(iu,ju,k)

```

```

        call fliplin(iu, jp(ju), k)                !FLIP -11
        ipoin(ka(k)) = -ia(-id)
        jpoin(k) = jp(ju)
    else
        call flipdia2(iu, jp(ju), k)              !FLIP +13
        ipoin(ka(k)) = iu
        jpoin(ka(k)) = jp(ju)
        ipoin(k) = -ia(-id)
        jpoin(k) = jd
    endif
endif
else
    if (.not. ((jd.eq.jp(-ju).or.jd.eq.-ju).and.
+       (id.eq.-iu.or.id.eq.ia(-iu)))) then
        call fliplin(id, jd, k)
        call flipcol(-iu, -ju, k)                !FLIP -7
        ipoin(ka(k)) = iu
        jpoin(ka(k)) = ju
        ipoin(k) = id
        jpoin(k) = jd
    else if (-iu.eq.id.and.-ju.eq.jd) then
        if (lat(id, jd, k).eq.lat(ip(id), jp(jd), k)) then
            call fliplin(id, jd, k)
            call fliplin(id, jp(jd), k)          !FLIP +14
            jpoin(ka(k)) = jp(jd)
            ipoin(k) = -ip(-iu)
        else
            call flipdia1(id, jd, k)             !FLIP -10
            ipoin(ka(k)) = -ip(-iu)
            jpoin(ka(k)) = ju
        endif
    endif
endif

```

```

        ipoin(k)=id
        jpoin(k)=jp(jd)
    endif
else if (ip(id).eq.-iu.and.ja(jd).eq.-ju) then
    if(lat(ip(id),jd,k).eq.lat(id,ja(jd),k)) then
        call fliplin(id,jd,k)
        call fliplin(id,ja(jd),k)           !FLIP -14
        jpoin(ka(k))=ja(jd)
        ipoin(k)=-ia(-iu)
    else
        call flipdia1(id,ja(jd),k)         !FLIP -9
        ipoin(ka(k))=-ia(-iu)
        jpoin(ka(k))=ju
        ipoin(k)=id
        jpoin(k)=ja(jd)
    endif
else if(id.eq.-iu.and.jd.eq.jp(-ju)) then
    if(lat(id,jd,k).eq.lat(ip(id),ja(jd),k)) then
        call fliplin(id,jd,k)
        call fliplin(id,ja(jd),k)         !FLIP +15
        jpoin(ka(k))=ja(jd)
        ipoin(k)=-ip(-iu)
    else
        call flipdia2(id,jd,k)             !FLIP -13
        ipoin(ka(k))=-ip(-iu)
        jpoin(ka(k))=ju
        ipoin(k)=id
        jpoin(k)=ja(jd)
    endif
else if(ip(id).eq.-iu.and.jd.eq.-ju) then

```



```

t=0
del=0
amz=0
amz2=0
amx2=0

do k=1,nniv
  t=t+naft(k)
  ifreq2(iabs(mz(k)))=ifreq2(iabs(mz(k)))+1
  amz=amz+iabs(mz(k))
  amz2=amz2+mz(k)**2
  if(ipoin(k).eq.0) del=del+1
enddo

```

* acumuladores para media de monte carlo das medias sobre os niveis

```

s1=s1+t/nniv
s2=s2+del/nniv
s4=s4+amz/nniv
s5=s5+amz2/nniv

```

*////////////////////////////////////

*****medias de monte carlo a cada ntom passos*****

```

if(icont.ge.ntom) then

```

```

  kmed=kmed+1

```

* vetorizacao das saidas

```

saida(1)=s1/(icont*nlin*ncol)      !<t/spin>
saida(2)=s2/icont                  !<delta>
saida(3)=s1/(s2*nlin*ncol)        !autovalor
saida(4)=s4/(icont*2.*nlin*ncol)   !<|Mz|/spin>
saida(5)=s5/(icont*4.*(nlin*ncol)**2)!<Mz**2/spin**2>
saida(6)=(1.-saida(3))/2          !<energia/spin>

```

* acumulacao pa calculo dos desvios e medias

```

call somat(kmed,saida)

write(6,fmt=fm) (saida(n),n=1,6)

kont=0
do m=0,nlin*ncol
if(ifreq2(m).ne.0) write(7,70) m,float(ifreq2(m))
    kont=kont+ifreq2(m)
    ifreq(m)=ifreq(m)+ifreq2(m)
enddo
write(7,70) -1,float(kont)

```

* zerando acumuladores de cada medida

```

icont=0
s1=.0
s2=.0
s4=.0
s5=.0
do m=0,nlin*ncol

```

```

        ifreq2(m)=0
        enddo

        endif

*****fim das medias de m.c.*****

        endif

*-/-/-/-/-/-/-/-/-/-/fim das medidas apos termalizacao-/-/-/-/-/-/-/-/-/
        enddo

*-----fim de cada medida de monte carlo-----

* calculo dos desvios

do i=1,6
    saida(i)=soma(i)/nmed
    if(nmed.gt.1) then
        soma2(i)=sqrt(abs((soma2(i)/nmed-saida(i)**2)/(nmed-1)))
    else
        soma2(i)=0.0
    endif
enddo

write(6,*) '          '
write(6,15) '<t>', '<delta>', '<lambda>', '<|mz|>', '<mz**2>',
+          'energia'
15  format(6(a12,1x),/)

write(6,fmt=fm) (saida(i),i=1,6)
write(6,fmt=fm) (soma2(i),i=1,6)
write(6,*) '          '

```

```

do m=0,nlin*ncol
if(ufreq(m).ne.0) write(7,70) m,float(ufreq(m))
akont=akont+ufreq(m)
enddo
70  format(1x,i7,3x,f11.0)
write(7,70) -1,akont

```

```

close(6)
close(7)
stop
end

```

* gerador de numeros aleatorios (M.J.Oliveira)

```

subroutine HEATRAND(ISEED)
common/random/ir(97),ii,iy
parameter (im=134456,iaa=8121,ic=28411,rm=1./im)

```

```

ii=iseed
ii=mod(ic+ii,im)
do jj=1,97
  ii=mod(iaa*ii+ic,im)
  ir(jj)=ii
enddo
ii=mod(iaa*ii+ic,im)
iy=ii
return
end

```

```

real function RAND()

```

```
common/random/ir(97),ii,iy
parameter (im=134456,iaa=8121,ic=28411,rm=1./im)
```

```
jj=1+(97*iy)/im
iy=ir(jj)
a=iy*rm
ii=mod(iaa*ii+ic,im)
ir(jj)=ii
rand=a
return
end
```

```
*****
```

```
*****
```

```
      SUBROUTINE FLIPLIN(i,j,k)
      common/all/lat(22,22,2100),nafj(2100),naft(2100),
+          mz(2100),ia(22),ip(22),ipp(22),ja(22),jp(22),
+          jpp(22),ka(2100),kp(2100),ipoin(2100),jpoin(2100)

      lat(i,j,k)=-lat(i,j,k)
      lat(ip(i),j,k)=-lat(ip(i),j,k)
      nafj(k)=nafj(k)
+          +lat(i,j,k)*lat(ia(i),j,k)+lat(ip(i),j,k)*lat(ipp(i),j,k)
      nafj(k)=nafj(k)
+          +lat(i,j,k)*(lat(i,ja(j),k)+lat(i,jp(j),k))
+          +lat(ip(i),j,k)*(lat(ip(i),ja(j),k)+lat(ip(i),jp(j),k))
      naft(k)=nafj(k)+nafj(k)
      mz(k)=mz(k)+4*lat(i,j,k)
      return
```

end

SUBROUTINE FLIPCOL(i,j,k)

common/all/lat(22,22,2100),nafi(2100),nafj(2100),naft(2100),

+ mz(2100),ia(22),ip(22),ipp(22),ja(22),jp(22),

+ jpp(22),ka(2100),kp(2100),ipoin(2100),jpoin(2100)

lat(i,j,k)=-lat(i,j,k)

lat(i,jp(j),k)=-lat(i,jp(j),k)

nafj(k)=nafj(k)

+ +lat(i,j,k)*lat(i,ja(j),k)+lat(i,jp(j),k)*lat(i,jpp(j),k)

nafi(k)=nafi(k)

+ +lat(i,j,k)*(lat(ia(i),j,k)+lat(ip(i),j,k))

+ +lat(i,jp(j),k)*(lat(ia(i),jp(j),k)+lat(ip(i),jp(j),k))

naft(k)=nafi(k)+nafj(k)

mz(k)=mz(k)+4*lat(i,j,k)

return

end

SUBROUTINE FLIPDIA1(i,j,k)

common/all/lat(22,22,2100),nafi(2100),nafj(2100),naft(2100),

+ mz(2100),ia(22),ip(22),ipp(22),ja(22),jp(22),

+ jpp(22),ka(2100),kp(2100),ipoin(2100),jpoin(2100)

lat(i,j,k)=-lat(i,j,k)

lat(ip(i),jp(j),k)=-lat(ip(i),jp(j),k)

nafj(k)=nafj(k)+lat(i,j,k)*(lat(i,ja(j),k)+lat(i,jp(j),k))

+ +lat(ip(i),jp(j),k)*(lat(ip(i),jpp(j),k)+lat(ip(i),j,k))

nafi(k)=nafi(k)+lat(i,j,k)*(lat(ia(i),j,k)+lat(ip(i),j,k))

+ +lat(ip(i),jp(j),k)*(lat(ipp(i),jp(j),k)+lat(i,jp(j),k))

```
naft(k)=nafi(k)+nafj(k)
```

```
return
```

```
end
```

```
*****
```

```
SUBROUTINE FLIPDIA2(i,j,k)
```

```
common/all/lat(22,22,2100),nafi(2100),nafj(2100),naft(2100),
```

```
+      mz(2100),ia(22),ip(22),ipp(22),ja(22),jp(22),
```

```
+      jpp(22),ka(2100),kp(2100),ipoin(2100),jpoin(2100)
```

```
lat(i,j,k)=-lat(i,j,k)
```

```
lat(ip(i),ja(j),k)=-lat(ip(i),ja(j),k)
```

```
nafj(k)=nafj(k)+lat(i,j,k)*(lat(i,jp(j),k)+lat(i,ja(j),k))
```

```
+      +lat(ip(i),ja(j),k)*(lat(ip(i),ja(ja(j)),k)+lat(ip(i),j,k))
```

```
nafi(k)=nafi(k)+lat(i,j,k)*(lat(ia(i),j,k)+lat(ip(i),j,k))
```

```
+      +lat(ip(i),ja(j),k)*(lat(ipp(i),ja(j),k)+lat(i,ja(j),k))
```

```
naft(k)=nafi(k)+nafj(k)
```

```
return
```

```
end
```

```
*****
```

```
SUBROUTINE SOMAT(kmed,saida)
```

```
dimension saida(7)
```

```
common/soma/soma(7),soma2(7)
```

```
if(kmed.eq.1) then
```

```
do 10 i=1,7
```

```
soma(i)=0.0
```

```
soma2(i)=0.0
```

```
10 continue
```

```
endif
```

```
do 20 i=1,7
```

```
soma(i)=soma(i)+saida(i)
soma2(i)=soma2(i)+saida(i)**2
20  continue
    return
    end
```
