

DALSON ELOY

EMARANHAMENTO E PROPRIEDADES CRÍTICAS
EM CADEIAS DE SPIN EXATAMENTE SOLÚVEIS

Orientador: José Cândido Xavier

Uberlândia - 2013

DALSON ELOY ALMEIDA

EMARANHAMENTO E PROPRIEDADES CRÍTICAS
EM CADEIAS DE SPIN EXATAMENTE SOLÚVEIS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Uberlândia como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.
Área de concentração: Física da Matéria Condensada/Física Estatística.

Orientador: José Cândido Xavier

Uberlândia

Fevereiro/2013

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU , MG, Brasil

A447e Almeida, Dalson Eloy, 1989-
2013 Emaranhamento e propriedades críticas em cadeias de spin exata-
 mente solúveis / Dalson Eloy Almeida. - 2013.
 96 f. : il.

Orientador: José Cândido Xavier.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Uberlândia, Pro-
grama de Pós-Graduação em Física.

Inclui bibliografia.

1. Física - Teses. 2. Matéria condensada - Teses. 3. Problema de
muitos corpos - Teses. I. Xavier, José Cândido. II. Universidade Fede-
ral de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDU: 53

DALSON ELOY ALMEIDA

EMARANHAMENTO E PROPRIEDADES CRÍTICAS
EM CADEIAS DE SPIN EXATAMENTE SOLÚVEIS

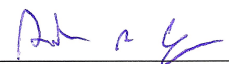
Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Uberlândia como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física. Área de concentração: Física da Matéria Condensada/Física Estatística.

Data de aprovação: 19 de fevereiro de 2013

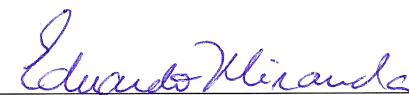
Banca Examinadora:



Prof. Dr. José Cândido Xavier - Orientador
INFIS/UFU



Prof. Dr. Antonino di Lorenzo
INFIS/UFU



Prof. Dr. Eduardo Miranda
IFGW/Unicamp

Resumo

Neste trabalho, investigamos o modelo unidimensional XY, bem como uma escada de *spins* de duas-pernas com interação de três-*spins* exatamente solúvel. Obtemos analiticamente as correções de tamanho finito das energias e determinamos a carga central, bem como as dimensões de escala. Utilizando o método da matriz de correlação, também estudamos as correções de tamanho finito da entropia de Rényi do estado fundamental e dos estados excitados. Nossos resultados estão em acordo com as previsões da teoria conforme de campos. Por último, mas não menos importante, no Apêndice A, resumimos os principais passos da diagonalização da hamiltoniana biquadrática geral em termos de operadores fermiônicos e ulteriormente, discutimos o método da matriz de correlação para o cálculo da entropia de Rényi.

Palavras-chave: Sistemas de muitos corpos, Modelos exatamente solúveis, Cadeia XY, Interação *multispin*, Fermionização, Propriedades críticas em sistemas de spins, Entropia de emaranhamento.

Abstract

In this work, we investigate the one-dimensional XY model, as well as an exactly solvable two-leg spin ladder with three-spin interactions. We obtain analytically the finite-size corrections of the low-lying energies and determine the central charge as well as the scaling dimensions. By using the correlation matrix method, we also study the finite-size corrections of the Rényi entropy of the ground state and of the excited states. Our results are in agreement with the predictions of the conformal field theory. Last but not least, in the appendix (Apêndice A), we summarize the main steps of the diagonalization of the general biquadratic hamiltonians in term of Fermi operators, and thereafter, we also discuss the correlation matrix method to calculate the Rényi entropy.

Keywords: Many body systems, Exactly solvable models, XY chain, Multispin interaction, Fermionization, Critical properties of spin systems, Entanglement entropy.

Agradecimentos

O trabalho apresentado nesta dissertação foi executado juntamente com meu orientador J. Cândido Xavier, cujos estímulos, disposição, críticas, boas ideias, instruções e cuidadosas revisões deste manuscrito são reconhecidos com profunda gratidão.

Agradeço também à agência FAPEMIG pelo amparo financeiro.

Conteúdo

Introdução	1
1 Fenômenos críticos e emaranhamento	6
1.1 Fenômenos críticos	6
1.2 Correções de tamanho finito da energia	14
1.3 O conceito de emaranhamento	16
1.4 A entropia de emaranhamento em sistemas unidimensionais	20
2 Solução exata e propriedade críticas do modelo XY	26
2.1 Diagonalização exata e diagrama de fases	27
2.2 Propriedades críticas	29
2.2.1 Modelo XX ($\gamma = 0$)	30
2.2.2 Campo magnético crítico $h_c = 1$	35
3 Emaranhamento no modelo XY	39
3.1 Modelo de Ising ($\gamma = 1$) e campo crítico $h_c = 1$	40
3.2 Modelo XX ($\gamma = 0$)	42
3.2.1 Estado fundamental	44
3.2.2 Estados excitados	48
4 Escada de duas-pernas com interação de três-<i>spins</i>	56
4.1 Diagrama de fases e propriedades críticas	57
4.2 Entropia de emaranhamento	62
4.2.1 Estado fundamental	63
4.2.2 Estados excitados	67
Conclusões e comentários finais	70
A Hamiltoniana biquadrática	74
A.I Diagonalização exata	74

<i>CONTEÚDO</i>	x
A.II Correlação e emaranhamento	76
Bibliografia	78

Introdução

As propriedades físicas dos componentes fundamentais do nosso mundo, formado por matéria e radiação, são descritas pela mecânica quântica. Tais componentes são partículas que raramente são encontradas isoladas e que usualmente interagem com o ambiente. E ainda, as propriedades físicas de um conjunto de partículas são em geral completamente diferentes do comportamento individual destas partículas, devido à interação entre elas. Em alguns casos, é possível descrever um sistema contendo muitas partículas interagentes simplesmente desprezando as interações entre as partículas. Por outro lado, em casos mais gerais, as interações entre os graus de liberdade microscópicos são a chave para os fenômenos que observamos. Por exemplo, ao tentarmos descrever os elétrons em um sólido, a chamada teoria de bandas é certamente aquela de maior sucesso. Contudo, se estes elétrons *interagem fortemente* entre si, não poderemos tratar perturbativamente suas interações, e então a teoria de bandas é falha.

Como já foi dito, as propriedades físicas de um sistema podem variar na presença de agentes externos (e.g., campo magnético). Em alguns casos, tais agentes externos alteram tão drasticamente as propriedades do sistema que elas são identificadas como outra fase. Nestes casos, dizemos que o sistema sofreu uma transição de fase. Certas transições de fase são caracterizadas por *pontos críticos*, nos quais as fases tornam-se indistinguíveis. Isto ocorre devido aos constituintes do sistema estarem correlacionadas em todas as escalas de distância no material, de modo que dizemos que o sistema é crítico e a escala espacial é perdida. Por outro lado, em sistemas ditos não críticos, estes constituintes interagem, principalmente, com seus vizinhos mais próximos. Assim, o comprimento de correlação ξ , distância sobre a qual as partículas estão efetivamente correlacionadas, é infinito (finito) em sistemas críticos (não críticos).

Um exemplo de sistema que apresenta um ponto crítico são os ferromagnetos. Aspirando estudar/entender tais sistemas Lenz propôs, em 1920, um simples modelo para Ising. Hoje este modelo é chamado de modelo de Ising. A versão unidimensional deste teve a sua solução analítica publicada por Ising em 1925 [1], pelo método da matriz de transferência,¹ o que demonstrou que o modelo unidimensional era insuficiente para se explicar uma transição de fase

¹Vale salientar que também investigamos as transições magnéticas, de modo exato, em um modelo ferromagnético de *spins* Ising gerais (S, S') dimerizado e com anisotropia de íons-simples [2].

ferromagnética à temperatura finita. Contudo, para o caso bidimensional, tal transição ocorre à temperatura não nula, vindo a ser provado com a solução exata obtida por Onsager em 1944 [3, 4]. Uma generalização do modelo de Ising foi proposta ainda no início do surgimento da mecânica quântica, o modelo Heisenberg, que também é fundamental em mecânica estatística e tem sido estudado até os dias de hoje. Finalmente, o modelo de Heisenberg pode também ser generalizado por modelos tais como o modelo de Hubbard [5] e o modelo de Kondo na rede ferromagnética [6]. Este último modelo pode ser usado para explicar a magneto-resistência colossal das manganitas [6]. O *prêmio Nobel da física* de 2007 foi exatamente devido à descoberta deste fenômeno.²

Ainda que o objetivo geral em Física da Matéria Condensada é de se descrever um sólido, que consiste de íons e elétrons em uma estrutura cristalina tridimensional, a solução de tal problema é inviável, em geral, tanto numérica, como analiticamente, o que justifica a criação de modelos com parâmetros de interação simplificados, como os dos exemplos citados no parágrafo anterior. De fato, um elemento chave da física teórica tem sido a conceptualização de fenômenos físicos através de modelos. No entanto, a investigação de tais modelos está sujeita às ferramentas matemáticas/computacionais disponíveis, e, até mesmo para modelos relativamente simples, normalmente, uma abordagem em três dimensões é uma tarefa extremamente complicada. Por conseguinte, sistemas em menores dimensões são consideravelmente mais simples de serem abordados do ponto de vista teórico. Aqui, estamos preocupados com modelos *quasi*-unidimensionais que são *exatamente solúveis*, i.e., aqueles cujas propriedades podem ser calculadas de modo analítico. Vale salientar que modelos teóricos *quasi*-unidimensionais são precisos na descrição de certos experimentos [9], sendo portanto mais do que apenas especulações matemáticas. A importância principal da obtenção de soluções exatas reside no fato de que estas nos permitem entender e caracterizar corretamente diversos fenômenos físicos, sendo assim são indiscutivelmente um assunto de grande interesse e, em geral, mais fáceis de serem estudados.

A história da solução exata de sistemas quânticos de muitos corpos remonta ao artigo de 1928 de Jordan e Wigner [10], no qual encontraram a relação exata entre operadores de levantamento/abaixamento de *spin*-1/2 e operadores fermiônicos de criação/aniquilação. De modo que tal correspondência permite converter sistemas de *spin*-1/2 em férmions interagentes sem *spin*. O próximo passo dessa história foi a solução de Bethe para o modelo de Heisenberg unidimensional de *spin*-1/2 em 1931 [11], o chamado *ansatz* de Bethe. Outro importante marco ocorreu em 1944, com a já citada solução exata para a função de partição do modelo de Ising bidimensional obtida por Onsager. Vale acentuar também que, em 1961, Lieb *et al.* [12] estudaram um sistema de L férmions governado por hamiltonianas biquadráticas, e mostraram que

²A magneto-resistência gigante foi primeiramente observada em fitas magnéticas [7, 8].

apesar do espaço de Hilbert da hamiltoniana ter tamanho 2^L a diagonalização desta é reduzida à solução de equações de valores próprios de duas matrizes de ordem L . Ainda nos anos 1960 novas aplicações para o *ansatz* Bethe foram descobertas, por exemplo: o estudo do gás de bósons com interação de função delta [13, 14]; e o modelo de Hubbard unidimensional [15, 16].³

Um novo capítulo na análise de modelos exatamente solúveis foi aberto com o advento da *teoria de campos conforme* (CFT) [18]. Em particular, várias restrições aparecem se assumirmos que os sistemas críticos são invariantes por transformações conformes. Além disso, as possíveis classes de comportamento crítico de sistemas quânticos unidimensionais ficam indexados pela anomalia conforme (carga central) c . Em meados dos anos oitenta, demonstrou-se através da CFT, como a carga central c pode ser extraída através do comportamento da energia do estado fundamental de sistemas grandes, porém finitos. E que além disso, os expoentes críticos, que governam o decaimento em lei de potência das funções de correlação, são também precisamente relacionados com os níveis de energia de sistemas próximos do limite termodinâmico.

Estas descobertas resultaram em um estudo sistemático das *correções de tamanho finito* nos espectros de diversos modelos. Provavelmente, este é um dos modos mais precisos de se determinar o comportamento crítico em sistemas unidimensionais, de modo que, merecidamente é um dos mais populares. Atualmente, devido à conexão entre as correlações quânticas e as propriedades de emaranhamento, é possível a localização de pontos críticos e a caracterização da classe de universalidade de comportamento crítico (carga central c) deles através de conceitos da informação quântica [19–25]. Esta é uma das razões pela qual, em anos recentes, a Física da Matéria Condensada e a Teoria de Informação têm mostrado interesses comuns, e consequentemente, ferramentas e ideias desenvolvidas em um campo têm dado novas compreensões ao outro.⁴

Sabe-se que o emaranhamento é uma das assinaturas mais peculiares da mecânica quântica, não possuindo nenhum análogo clássico. Por exemplo, uma “partícula” que classicamente possui apenas dois possíveis estados, pela mecânica quântica, poderia estar simultaneamente nos dois estados binários. Quando temos um sistema com mais de uma “partícula”, cada uma delas pode estar em um estado de superposição, o que resultaria num estado global emaranhado. Notadamente, o *prêmio Nobel da física* deste ano foi consagrado ao desenvolvimento de métodos para a medida e manipulação de partículas individuais sem destruir sua natureza quântica (estado de superposição). Abaixo, retomaremos, ainda qualitativamente, o conceito da conexão entre emaranhamento e a caracterização de fases quânticas.

Podemos, basicamente, rotular as hamiltonianas de sistemas de muitos corpos em duas clas-

³Veja a Ref. [17] para uma introdução ao fascinante assunto de sistemas que podem ser resolvidos exatamente.

⁴Outro grande motivador para o compartilhamento de interesses e esforços destas áreas está na mais audaz tentativa de se projetar um computador quântico. Esta ideia foi proposta por Feynman, em 1982 [26], quando ele planejou um sistema quântico abstrato capaz de efetuar computação.

ses. Aquelas cujos espectro de energia, no limite termodinâmico, apresenta um *gap* finito (nulo) são ditas não críticas (críticas).⁵ Em geral, os autoestados destas hamiltonianas são compostos de sobreposições de estados produtos, i.e., se o sistema descrito pela hamiltoniana é dividido em duas partes, elas, em geral, são emaranhadas e por isso compartilham informação. Uma possível medida desta informação compartilhada é inferida pela entropia de emaranhamento. Ingenuamente, poderíamos esperar que esta entropia fosse uma quantidade extensiva, i.e., proporcional ao volume do subsistema, mas isto não ocorre. Lembrando que estamos interessados na informação mutuamente compartilhada, não em uma informação contida em uma dada parte, e que as duas partes compartilham a superfície que as separam, deveríamos esperar então que a entropia seja proporcional a esta área. Isto é de fato esperado para sistemas não críticos, cujo comprimento de correlação ξ é finito, e é bem conhecido como Lei entrópica da Área [27]. Em contrapartida, em sistemas críticos ($\xi \rightarrow \infty$), as partes do sistema compartilham informação muito além dos graus de liberdade em torno da superfície que os separa. De modo que o conhecimento de apenas uma das partes implica em uma perda da informação (aumento da entropia). Portanto uma violação da Lei entrópica da Área é esperada [27] [ver também a Figura 1.3.1(d)].

Nesta dissertação, no Capítulo 1, vamos apresentar a mais usual medida de quantidade de informação compartilhada entre duas partes de um sistema, a entropia de Rényi. Discutiremos também como encontrar a carga central por meio desta entropia (comportamento geral da violação da Lei da Área).

Nos Capítulos seguintes, estudaremos alguns sistemas de *spins quasi*-unidimensionais exatamente solúveis utilizando os métodos mencionados acima. A saber, no Capítulo 2 apresentaremos a solução exata do modelo unidimensional XY em um campo transversal, discutindo seu espectro de energias e calculando de modo exato sua carga central; como veremos $c = 1$ e $c = 1/2$ para os casos isotrópico e campo externo crítico, respectivamente. Por fim, o Capítulo 3, será dedicado ao estudo das propriedades de emaranhamento do modelo XY, no qual calcularemos as entropias de Rényi utilizando o método das correlações, cujos resultados compararemos com as previsões da CFT. Na verdade, para o modelo XX, estes resultados podem ser calculados de modo exato, embora este não será o nosso foco. Quanto à entropia de Rényi de estados excitados, por um lado, alguns resultados esperados de trabalhos anteriormente serão confirmados [28, 29], por outro lado, o comportamento das entropias de Rényi para excitações ditas não-compactas serão interpretados/discutidos de um modo diferente da proposta original [28, 29].

No Capítulo 4 consideraremos um modelo, exatamente solúvel, em geometria de escadas de duas pernas e com interação de três-*spins*. Este modelo possui um interessante diagrama de fases com regiões com *gap finito* (regiões não crítica) e regiões com um e dois *modos de gap*-

⁵É esperado que o *gap* seja inversamente proporcional ao comprimento de correlação.

nulo (regiões críticas). Obteremos analiticamente as correções de tamanho finito das energias para as regiões de *gap* nulo, e como consequência sua carga central; a saber, esta escada possui a mesma classe de universalidade de comportamento crítico do modelo XX, $c = 1$. Como usual, utilizaremos o método da matriz de correlação para o cálculo das entropias de Rényi. O comportamento destas entropias foi completamente entendido nas duas regiões não críticas, inclusive um resultado não trivial foi encontrado, considerando o sistema com condições de contorno periódica, na região crítica com dois modos de *gap*-nulo, a entropia de von Neumann exibe fortes oscilações.

Finalizando, apresentamos no Apêndice A, para uma hamiltoniana biquadrática geral em operadores fermiônicos: (i) sua diagonalização exata através das transformações de Bogoliubov; (ii) a entropia de Rényi em função dos autovalores da matriz de correlação.

Nossas contribuições originais, tanto para o avanço no entendimento das correções de tamanho finito da entropia de Rényi do estado fundamental em sistemas de *spins* (Subseção 4.2.1), quanto para a investigação da entropia de Rényi de estados excitados (Subseções 3.2.2 e 4.2.2) foram recentemente publicados na revista *Physical Review B* [30].

Capítulo 1

Fenômenos críticos e emaranhamento

Neste capítulo apresentaremos diversos conceitos básicos que serão fundamentais para a compreensão do restante deste texto. Também listaremos diversos resultados gerais que serão amplamente utilizados nos capítulos seguintes. Já na próxima seção, introduziremos algumas noções fundamentais para a compreensão de fenômenos críticos. Com certeza, uma das características mais importantes observadas no estudo de fenômenos críticos é a *universalidade*: diferentes sistemas¹ apresentam comportamento idênticos quando são reescalados por algum parâmetro crítico. Tal conceito será melhor explicado no decorrer deste capítulo. A fim de entender qualitativamente o conceito de comportamento crítico, vamos primeiramente introduzir as definições de ponto crítico, parâmetro de ordem, expoentes críticos, etc. Finalmente, nas seções seguintes, resumiremos as previsões da CFT para as correções de tamanho finito das energias e das entropias de emaranhamento.

1.1 Fenômenos críticos

Consideremos um pedaço de algum material, medimos algumas de suas propriedades macroscópicas, por exemplo sua densidade, compressibilidade, magnetização ou susceptibilidade. Divide-se então este material em duas partes, mantendo as variáveis externas (pressão, campo magnético, etc.) fixadas, e observa-se que as propriedades macroscópicas não são alteradas. Entretanto este processo não pode ser repetido infinitamente. Eventualmente, após muitas iterações, comportamentos estranhos irão surgir, uma vez que quando alcançarmos a escala atômica, o comportamento individual de átomos e moléculas (diferente do comportamento do material que eles/elas constituem) regerá as propriedades físicas do sistema. O comprimento de escala em que as propriedades globais dos pedaços começam a diferir acentuadamente das originais dá-nos uma medida do que é conhecido como *comprimento de correlação* ξ . Ou seja, a distância sobre

¹Desde que as hamiltonianas possuam as mesmas simetrias e mesma dimensão.

a qual flutuações aparecem devido aos graus de liberdade microscópicos serem correlacionados uns com os outros (veja por exemplo as Refs. [31–33]).

Usualmente o comprimento de correlação é da ordem de alguns espaçamentos atômicos, embora este dependa das condições externas que determinam o estado do sistema. É bem conhecido que os sistemas mudam abruptamente seu comportamento macroscópico mesmo para suaves mudanças das variáveis externas. Neste caso dizemos que ocorreu uma *transição de fase* a partir de um estado para outro. Existem basicamente duas maneiras nas quais tais transições ocorrem [32, 33]:

(i) transição de fase *descontínua* ou de *primeira ordem*, na qual o comprimento de correlação é finito. Neste caso, parte do sistema completou a transição e outras partes não, i.e., existe um regime de estado misto entre os dois (ou mais) estados. Certamente, o exemplo mais conhecido desta classe de transição é a fusão de um sólido tridimensional. O sistema absorve ou libera energia, a uma taxa fixa, enquanto que a temperatura permanece constante. A estrutura do material muda drasticamente a partir de um estado estável para outro, e ainda o sólido não passa instantaneamente para líquido, mas sim forma uma mistura de domínios sólidos (moléculas arranjadas em uma rede cristalina) e domínios líquidos (não existe rede e as moléculas percorrem caminhos desordenados) no ponto de fusão;

(ii) transição de fase *contínua* ou de *segunda ordem*, na qual o comprimento de correlação torna-se efetivamente infinito. Neste caso, as flutuações estão correlacionadas em todas as escalas de distância no material, forçando então o sistema a estar em uma única, e crítica, fase. À medida que este *ponto crítico* é aproximado as duas (ou mais) fases tornam-se idênticas. Retornando ao exemplo do fluido, agora na transição entre a fase líquida e a gasosa, que é uma transição de primeira ordem, visto que, a densidade dos domínios do material pode ser escolhida entre dois valores bem definidos, um alto (líquido) e outro baixo (vapor). Entretanto esta linha de transição de fase é bem conhecida por terminar em um ponto, o ponto crítico líquido-gás, no qual líquido se transforma em gás continuamente e a escolha entre duas densidades cessa. Então, devido às flutuações de densidade dizemos que não existe distinção entre as fases líquidas e gasosas, se próximas do ponto crítico. Esta transição de fase é marcada pelo chamado fenômeno da opalescência crítica, no qual o líquido fica com uma aparência leitosa, dado que as flutuações de densidade produzem flutuações no índice de refração [33].

A fim de distinguir de modo mais preciso como um sistema vai de uma fase para outra, e ainda caracterizar a transição, é necessário introduzirmos o conceito de *parâmetro de ordem*: que é a quantidade física que diferencia duas fases, ou mais, entre si. Em geral, esta quantidade tem uma média térmica nula em uma fase (tipicamente a fase de maior temperatura) e uma média não nula na outra fase. Infelizmente, esta definição não é totalmente precisa, pois podem existir mais de uma quantidade indeterminada, na verdade, a identificação do parâmetro de

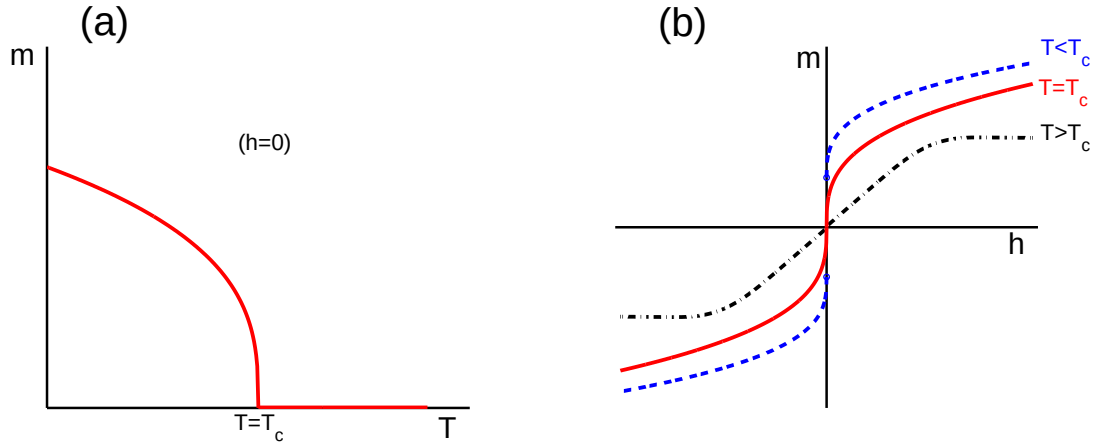


Figura 1.1.1: Gráficos qualitativos para um material magnético genérico. (a) Magnetização em função da temperatura na ausência de campo externo. (b) Magnetização em função do campo magnético aplicado para diversas temperaturas. Note que para $T < T_c$ e $h \rightarrow 0^\pm$ temos magnetizações $\pm m_0$, i.e., duas possíveis.

ordem é uma difícil tarefa requerendo certa habilidade.

Apesar do introdutório e pedagógico exemplo de um fluido, nosso objetivo aqui é o tratamento de sistemas magnéticos. Iniciemos portanto com uma visão qualitativa do que é o ferromagnetismo. Sabemos que os átomos de certos materiais possuem um tipo de momento angular intrínseco conhecido como *spin*, enquanto que a nível macroscópico a quantidade física acessível é a *magnetização* $\vec{m}$, que é simplesmente definida como o *valor médio das variáveis de spin* dentro de um volume de interesse do material. Para muitos materiais os *spins* orientam-se aleatoriamente, de modo que a magnetização total produzida por eles é nula, entretanto existe uma outra classe de materiais em que se observa macroscopicamente uma magnetização não nula, devido à interação dos *spins*. Em tais materiais, conhecidos como *ferromagnéticos*, isto é observado para valores de temperaturas menores que um valor T_c , a *temperatura crítica* ou de *Curie*, que depende do material em questão [31–33].

Para $T = 0$ todos os *spins* estão perfeitamente alinhados uns com os outros (obedecendo ao princípio de mínima energia), entretanto, quando a temperatura começa a aumentar, uma “bagunça térmica” randomiza os *spins*. Não obstante, continuamos a observar uma magnetização finita, uma vez que ainda estamos em uma fase ordenada, pois alguns *spins* continuam alinhados. Finalmente, quando a temperatura crítica T_c é alcançada esta fração desaparece, o material torna-se um *paramagnético*, exibindo uma fase desordenada (princípio de máxima entropia). Na Figura 1.1.1(a) mostramos, qualitativamente, o comportamento da magnetização em função da temperatura para um material magnético, sem a influência de um campo magnético externo, i.e., $h = 0$. É observado experimentalmente que, para T suficientemente próximo de T_c , a

magnetização tem o seguinte comportamento em lei de potência [31–33]

$$m = m_0 (T - T_c)^\beta, \quad (1.1.1)$$

parametrizado pelo expoente crítico β .

O outro parâmetro externo que podemos variar é o campo magnético h . Observa-se que abaixo da temperatura crítica ($T < T_c$) o vetor magnetização $\vec{m}$ não é fixo e depende da orientação do vetor campo magnético, e ainda, para $h = 0$ temos uma livre escolha que depende do estado do sistema antes do campo ser desligado. Ou seja, a magnetização é descontínua, tendo um comportamento qualitativo como mostrado na Figura 1.1.1(b). Esta descontinuidade é característica de uma transição de fase de primeira ordem, aproximando-se de zero quando a temperatura tende à temperatura crítica e deixa de existir para $T > T_c$. O ponto $h = 0$ e $T = T_c$ é então outro exemplo de *ponto crítico* no qual a transição de primeira ordem torna-se contínua.

A magnetização, grandeza que quantifica a ordem magnética, é o *parâmetro de ordem* desta transição. Como mencionado no primeiro parágrafo, a maioria das quantidades físicas de interesse exibem um comportamento anômalo em lei de potência quando o sistema está suficientemente próximo do ponto crítico (no caso $h = 0$ e $T = T_c$). Entretanto, a classificação do ponto crítico depende de como os *spins* estão correlacionados. Conforme dito no segundo parágrafo, uma importante medida desta correlação é o comprimento de correlação ξ , que é uma medida da distância na qual os *spins* estão correlacionados, ou melhor, o tamanho típico das regiões em que os *spins* estão alinhados.

Inicialmente vamos focar a nossa atenção nos aspectos clássicos do problema, i.e., considerando os *spins* como graus de liberdade clássicos. Supomos que a cada *spin* está associado com um vetor $\vec{S}(\vec{r})$ que está localizado em um sítio $\vec{r}$ de uma rede d -dimensional de hipervolume V . Logo estes *spins* formam um campo vetorial (com a dimensão do espaço de *spins* considerado) em um espaço de dimensão d .² Seja $\mathcal{H}_{\text{int}}$ a energia devido às interações entre os *spins*, então, a hamiltoniana do sistema é $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{int}} - \vec{h} \cdot \vec{S}_T$, sendo o último termo a interação do *spin* total $\vec{S}_T = \sum_{\vec{r}} \vec{S}(\vec{r})$ com o campo externo $\vec{h}$, de modo que a magnetização é $\vec{m} = \langle \vec{S}_T \rangle / V$. Vamos então definir a função de correlação de dois pontos, que mede o grau de alinhamento entre dois *spins* nas posições $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$, da seguinte forma

$$G^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \langle \vec{S}(\vec{r}_1) \cdot \vec{S}(\vec{r}_2) \rangle.$$

É importante, do ponto de vista teórico, imaginarmos agora que o sistema é invariante à translação e rotação, de modo que $G^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = G^{(2)}(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$ e $\langle \vec{S}(\vec{r}_1) \rangle = \langle \vec{S}(\vec{r}_2) \rangle = \vec{S}_0$.

²Por simplicidade, suporemos que a densidade de *spins* é unitária, i.e., $N = V$, onde N é o número de spins na rede.

Uma melhor medida é a *função de correlação conectada*

$$G_c^{(2)}(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) = \left\langle \left[\vec{S}(\vec{r}_1) - \vec{S}_0 \right] \cdot \left[\vec{S}(\vec{r}_2) - \vec{S}_0 \right] \right\rangle, \quad (1.1.2)$$

que quantifica a correlação do desvio da média $\vec{S}_0$ de cada *spin*. Sendo então conveniente para medir as flutuações para o caso $T < T_c$, uma vez que neste caso os *spins* estão predominantemente alinhados. Note que,

$$G_c^{(2)}(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) = \left\langle \vec{S}(\vec{r}_1) \cdot \vec{S}(\vec{r}_2) \right\rangle - \left\langle \vec{S}(\vec{r}_1) \right\rangle \cdot \left\langle \vec{S}(\vec{r}_2) \right\rangle$$

é a dependência estatística entre os *spins* distantes de $|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|$. Somando a equação acima sobre todos os valores de $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$ temos $\sum_{\vec{r}_1, \vec{r}_2} G_c^{(2)}(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) = \left\langle \left(\vec{S}_T - \langle \vec{S}_T \rangle \right)^2 \right\rangle = k_B T \partial_h \langle S_T \rangle$. Sendo k_B a constante de Boltzmann, S_T a componente do *spin* total ao longo da direção do campo magnético $\vec{h}$ ($S_T = \hat{h} \cdot \vec{S}_T$) e a derivada termodinâmica é proporcional à susceptibilidade χ . Esta última é dada por

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{\langle S_T \rangle}{V} \right),$$

que portanto indica a resposta da magnetização a uma pequena variação do campo magnético.

Finalmente, devido às simetrias de rotação e translação, $\sum_{\vec{r}_1} G_c^{(2)}(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|)$ é independente de $\vec{r}_2$ e portanto

$$\chi = (k_B T)^{-1} \sum_{r=0}^{\infty} G_c^{(2)}(r), \quad (1.1.3)$$

o que nos leva a concluir que a susceptibilidade é uma medida da coerência estatística de um sistema, i.e., da correlação entre os *spins* do sistema. Deste modo, próximo ao ponto crítico ($h = 0$ e $T \rightarrow T_c$), no qual os *spins* estão todos correlacionados, deve haver uma divergência na susceptibilidade. Isto é de fato observado, e também em forma de lei de potência [31–33]

$$\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma}. \quad (1.1.4)$$

A configuração de *spin* é obtida experimentalmente através de espalhamento de nêutrons, por exemplo. Nesse experimento os momentos magnéticos dos nêutrons interagem com os *spins* dos elétrons. O que é medido é a seção de choque, ou taxa de espalhamento, que é proporcional à transformada de Fourier de $G_c^{(2)}(r)$ (veja por exemplo a Ref. [31]), de modo que podemos ter uma imagem da configuração de *spin* via transformada inversa.

Longe do ponto crítico $T \neq T_c$ é observado que a função correlação tem um decaimento exponencial assintótico com a distância [32],

$$G_c^{(2)}(r) \propto \frac{e^{-r/\xi}}{r^n}, \quad r \gg \xi, \quad (1.1.5)$$

expoente	definição	condição
β	$m \propto (T_c - T)^\beta$	$T < T_c$ e $h = 0$
δ	$m \propto h^{1/\delta}$	$T = T_c$
γ	$\chi = \partial_h m \propto T - T_c ^{-\gamma}$	$h = 0$
α	$C \propto T - T_c ^{-\alpha}$	$h = 0$
ν	$\xi \propto T - T_c ^{-\nu}$	$h = 0$
η	$G_c^{(2)}(r) \propto r^{-(d-2+\eta)}$	$T = T_c$

Tabela 1.1: Definição dos expoentes críticos mais comuns [31–34]. Sendo C o calor específico.

sendo n um número real e ξ o comprimento de correlação. Por outro lado, no ponto crítico o sistema comporta-se completamente diferente, neste limite $\xi \rightarrow \infty$, e a correlação decai com outra lei de potência anômala [31, 32]

$$G_c^{(2)}(r) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad (1.1.6)$$

sendo η seu expoente crítico e d a dimensão do sistema. Então, em geral devemos ter $G_c^{(2)}(r) \propto \frac{g(r/\xi)}{r^{d-2+\eta}}$, o que enfatiza que o comprimento de correlação deve divergir no ponto crítico. A fim de caracterizar esta divergência definimos outro expoente crítico ν , tal que para $h = 0$

$$\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}. \quad (1.1.7)$$

Na Tabela 1.1 apresentamos as definições dos expoentes críticos associados a várias quantidades físicas. É importante salientar que as propriedades observadas na transição de fase são ditas *universais* no sentido que: sistemas microscopicamente distintos terão o mesmo conjunto de expoentes críticos, desde que as hamiltonianas compartilhem as mesmas simetrias e tenham a mesma dimensão. É devido a este fato que o mesmo tipo de singularidades é encontrado em sistemas completamente diferentes, por exemplo no fluido, i.e., os expoentes críticos seguem uma regra idêntica à do ferromagneto (fazendo a equivalência entre as variáveis de cada problema).

É importante salientar que estes expoentes não são todos independentes, por exemplo, usando as Eqs. (1.1.3) e (1.1.7), temos $\chi \sim \int_0^\infty dr \frac{g(r/\xi)}{r^{d-2+\eta}} \stackrel{r=\xi z}{=} \xi^{2-\eta} \int_0^\infty dz z^{1-\eta} g(z) \sim \xi^{2-\eta} \sim |T - T_c|^{-\nu(2-\eta)}$ e então, através de uma simples análise dimensional com a Eq. (1.1.4), é possível obter a lei de escala $\gamma = \nu(2 - \eta)$, conhecida como lei de Fisher [34, 35].

A primeira tentativa que podemos fazer, a fim de obter as singularidades, ou melhor os expoentes críticos, é utilizar a conhecida *teoria de campo médio*. Na qual se supõe que cada *spin* está em um campo magnético local, que é soma do campo externo e de um campo devido à interação entre os *spins* vizinhos. E este último é uma função da média de todos os *spins*, i.e., a magnetização. Esta teoria simples prevê um comportamento em lei de potência para as grandezas termodinâmicas e ainda independentes dos detalhes do sistema (acoplamentos e

constantes, por exemplo). Embora os expoentes não coincidam com os experimentais, tal teoria apresenta a universalidade observada.

Formularemos agora a chamada hipótese de escala supondo que o sistema além de invariante à translação e rotação é também invariante à mudança de escala. A hipótese de escala consiste em supor que, próximo do ponto crítico, a densidade de energia livre (ou a energia livre por sítio no caso de sistemas discretos) é uma função homogênea generalizada de suas variáveis [32, 35, 36]. Os parâmetros da energia livre, no ensemble canônico, são a temperatura e o campo magnético [33]. É útil definirmos aqui a temperatura reduzida $t = T/T_c - 1$, e portanto

$$f(\lambda^a t, \lambda^b h) = \lambda f(t, h), \quad (1.1.8)$$

sendo λ um número real. Note que escolhendo $\lambda = t^{-1/a}$ temos $f(t, h) = t^{1/a} g(h/t^{b/a})$, e portanto $m = -\partial_h f|_{h=0} = -g'(0)t^{(1-b)/a}$, que comparado com a Tabela 1.1 se conclui que $\beta = (1-b)/a$. Repetindo um procedimento análogo para as quatro primeiras linhas desta tabela, obtemos as seguintes leis de escala $\gamma = (2b-1)/a$, $\alpha = 2 - 1/a$ e $\delta = b/(1-b)$.³ No entanto, devemos nos perguntar, podemos fazer a hipótese de escala [Eq. (1.1.8)]? e se sim, quais são os expoentes a e b ?

A fim de responder as perguntas acima voltemos à definição da hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{int}} - \vec{h} \cdot \sum_{\vec{r}} \vec{S}_{\text{cell}}(\vec{r}), \quad (1.1.9)$$

sendo $\vec{S}_{\text{cell}}$ as variáveis de *spins* definidas nos sítios de uma rede d -dimensional com espaçamento de rede a . Fazemos agora uma reescala na unidade de comprimento, agrupando b^d sítios (células) em um bloco de lado ab , conforme Figura 1.1.2. As novas variáveis de *spins* são definidas, no centro dos blocos, como

$$\vec{S}_{\text{bloc}}(\vec{r}') = \frac{1}{R} \sum_{\vec{r} \in \text{bloco}} \vec{S}_{\text{cell}}(\vec{r}), \quad (1.1.10)$$

sendo R uma constante normalização.

A energia total deve ser independente da escala espacial, i.e., invariante às transformações de escala. A nova hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}'_{\text{int}} - \vec{h}' \cdot \sum_{\vec{r}'} \vec{S}_{\text{bloc}}(\vec{r}'), \quad (1.1.11)$$

em particular, as hamiltonianas (1.1.9) e (1.1.11) devem envolver a mesma interação com o campo externo, e para isso ser verdade devemos ter $\vec{h}' = R \vec{h}$. Visto que a energia total não é

³Note que o *parâmetro de ordem*, a magnetização, é proporcional à *derivada primeira da energia livre* por sítio em relação ao parâmetro externo campo magnético, e é contínua no ponto crítico. Por outro lado, a *derivada segunda da energia livre*, i.e., a susceptibilidade magnética, é descontínua no ponto crítico. Está é a definição usual de Ehrenfest para transições de fase de segunda ordem [33].

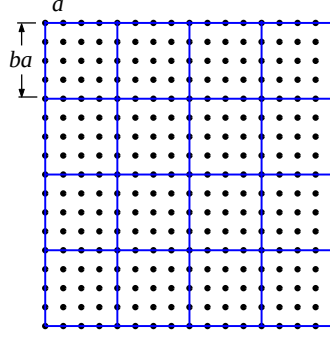


Figura 1.1.2: Renormalização em uma rede d -dimensional com espaçamento de rede a : b^d sítios são agrupados em um bloco de lado ab .

alterada com a mudança de escala, a energia livre total também não será. Mas como o comprimento Δx é reescalado com $\Delta x' = b^{-1}\Delta x$, então o volume reescala por um fator b^{-d} . Dizemos que (-1) e $(-d)$ são as dimensões de escala do comprimento e do volume, respectivamente. Portanto, conclui-se que a densidade de energia tem uma dimensão de escala d , i.e., é reescalada por um fator b^d , matematicamente $f' = b^d f$. A temperatura também é reescalada, através da Eq. (1.1.7) pode-se ver que $t' = b^{1/\nu}t$. Portanto, falta agora calcularmos o fator de escala do campo magnético. Este é facilmente obtido da correlação (1.1.2), calculando a média para cada hamiltoniana, e usando que $\langle \dots \rangle_{\text{cell}} = \langle \dots \rangle_{\text{bloco}}$, que segue da invariância da função de partição. Deste modo temos que $G_c^{(2)}(r', \mathcal{H}') = R^{-2}b^{2d}G_c^{(2)}(br', \mathcal{H})$. Lembrando que no ponto crítico $G_c^{(2)}(br', \mathcal{H}) = 1/(br')^{d-2+\eta}$, conforme Eq. (1.1.6), conclui-se que $R = b^{(d+2-\eta)/2}$, o que resulta em

$$f(t, h) = b^{-d}f(t', h') = b^{-d}f(b^{1/\nu}t, b^{(d+2-\eta)/2}h),$$

da qual vemos que a energia livre é de fato uma função homogênea generalizada.

Esta equação não é mais geral do que a definição (1.1.8), uma vez que para $b = \lambda^{1/d}$ esta é recuperada, implicando que $a = 1/\nu d$ e $b = (d + 2 - \eta)/2d$. Portanto da hipótese de escala seguem as seguintes leis de escalas

$$\begin{aligned} \alpha &= 2 - \nu d \\ \beta &= (d - 2 + \eta)\nu/2 \\ \gamma &= \nu(2 - \eta) \\ \delta &= (d + 2 - \eta)/(d - 2 + \eta) \end{aligned}, \quad (1.1.12)$$

da qual vemos que temos apenas dois expoentes independentes.

Todos os resultados até agora obtidos foram encontrados sem referência a qualquer modelo. O critério para a escolha de um modelo microscópico não é rígido e depende do fenômeno de interesse. Se a estrutura do modelo descreve o sistema de estudo, então as quantidades físicas

calculadas devem concordar com as observadas, e esta deve ser a regra básica para escolhermos o modelo.

Discussões mais detalhadas dos conceitos apresentados nesta seção, bem como a solução de diversos modelos clássicos, tais como, o modelo de Ising, o modelo de Ginzburg-Landau e muitos outros, podem ser encontradas nas Refs. [31–38].

Vale salientar ainda que, as transições de fase discutidas aqui nesta seção, bem como suas propriedades, só surgem no limite termodinâmico, i.e., quando o volume do sistema e o número de partículas é efetivamente infinito. Nas próximas seções concentraremos nossa atenção nas correções de tamanho finito das quantidades físicas próximas de pontos críticos. Nesse sentido, nosso foco será no espectro de energia na Seção 1.2 e na entropia de emaranhamento na Seção 1.4. Além disso, o conceito de entropia de emaranhamento será discutido na Seção 1.3.

1.2 Correções de tamanho finito da energia

Nesta seção trataremos de *sistemas quânticos unidimensionais* cujos graus de liberdade estão localizados em uma cadeia. Além da simetria de translação, assumiremos que o sistema é invariante frente às transformações conformes. Como é bem conhecido, sistemas quânticos em d -dimensões podem ser mapeados em *sistemas clássicos* em $(d + 1)$ -dimensões [39]. As transformações conformes que estamos nos referindo nos sistemas quânticos unidimensionais se referem na verdade às transformações no espaço bidimensional dos sistemas clássicos [36]. Transformações conformes são basicamente transformações de escala, onde o fator de reescala é uma função da posição, i.e., é uma generalização da dilatação global $r' = br$ que muda o comprimento dos vetores localmente (ponto a ponto), i.e., $r' = b(r)r$. Geometricamente, uma transformação conforme deixa invariante o ângulo entre quaisquer curvas. Se assumirmos que os sistemas críticos são invariantes por transformações conformes, vários vínculos aparecem (inclusive nas funções de correlações) [40–42]. Devido a esses vínculos, as possíveis classes de universalidade de comportamento críticos passam a ser indexadas pela *carga central* ou *anomalia conforme* c , bem como as dimensões escalares dos operadores primários $\varphi_{(n)}$. A seguir apresentaremos vários resultados que são bem estabelecidos (ver por exemplo [36]), contudo, suas demonstrações fogem do escopo desta dissertação, sendo assim, não serão apresentadas aqui.

O primeiro resultado relaciona a carga central com a energia do estado fundamental. A energia do estado fundamental de um sistema unidimensional de comprimento L , com condições periódicas de contorno (PBC) e invariante por transformações conformes, deve comportar-se

assintoticamente como (veja também [43])

$$\frac{E_0}{L} = e_\infty - \frac{c\pi}{6L^2}v_s + o(L^{-2}), \quad (1.2.1)$$

sendo e_∞ a energia livre por sítio, v_s a velocidade do som (ou velocidade de Fermi) e c a já mencionada carga central. As quantidades e_∞ e v_s dependem do modelo, e portanto são não universais, enquanto que o coeficiente c caracteriza a universalidade do ponto crítico, ou seja, cada classe de universalidade de comportamento crítico é rotulada por um dado valor de c [e.g., Eq. (1.2.5)].

Já a estrutura dos estados excitados está associada com as dimensões escalares dos operadores primários. Há uma torre de estados no espectro da hamiltoniana com energias $E_{j,j'}^\Delta$, que se comporta assintoticamente como [32, 36]

$$E_{j,j'}^\Delta = E_0 + \frac{2\pi v_s}{L}(\Delta + j + j') + o(L^{-1}) \quad j, j' = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.2.2)$$

sendo Δ as dimensões de escala (que estão relacionadas com os expoentes críticos) dos operadores primários, e $X_{j,j'}^\Delta = \Delta + j + j'$ as dimensões de escala dos operadores descendentes.

Finalmente, os momentos associados com a autoenergia $E_{j,j'}^\Delta$ são dados por

$$P_{j,j'}^s = \frac{2\pi}{L}(s + j - j'), \quad (1.2.3)$$

sendo s conhecido como *spin* planar.

Na linguagem da CFT, os operadores primários são caracterizados por dois pesos conformes $(h_{(n)}, \bar{h}_{(n)})$, que são relacionados com a dimensão de escala $\Delta_{(n)}$ e o spin $s_{(n)}$ da seguinte forma [36]

$$h_{(n)} = \frac{\Delta_{(n)} + s_{(n)}}{2} \quad \bar{h}_{(n)} = \frac{\Delta_{(n)} - s_{(n)}}{2}, \quad (1.2.4)$$

a partir destes operadores primários são formados os operadores descendentes que devem obedecer às torres de energias e de momentos dadas pelas Eqs. (1.2.2) e (1.2.3).⁴

Outros resultados interessantes referem-se aos possíveis valores de c e $h_{(n)}$, os quais descrevemos sucintamente abaixo. Para teorias conformes com $c < 1$ os possíveis valores da carga central são [36, 44]

$$c = 1 - \frac{6}{m(m+1)}, \quad m = 3, 4, \dots \quad (1.2.5)$$

e ainda, devemos ter $m(m-1)/2$ pesos conformes dados por

$$h_{(p,q)} = \frac{[(m+1)p - mq]^2 - 1}{4m(m+1)}, \quad (1.2.6)$$

⁴Comumente as excitações advindas de operadores descendentes são chamadas de excitações “filhotes”.

j	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
$h = 0$	1	0	1	1	2	2	3	3	5	5	7	8	11	12	16	18
$h = \frac{1}{16}$	1	1	1	2	2	3	4	5	6	8	10	12	15	18	22	27
$h = \frac{1}{2}$	1	1	1	1	2	2	3	4	5	6	8	9	12	14	17	20

Tabela 1.2: Degenerescência dos campos descendentes para carga central $c = 1/2$ calculadas na Ref. [44].

com p e q inteiros satisfazendo: $1 \leq p \leq m-1$, $1 \leq q \leq p$. Os primeiros membros da sequência com $m = 3, 4, 5$ e 6 , i.e., com carga central $c = 1/2, 7/10, 4/5$ e $6/7$, caracterizam as classes de comportamento crítico do modelo de Ising, do modelo de Ising tricrítico, do modelo de Potts de 3-estados e do modelo de Potts de 3-estados tricrítico, respectivamente.

Por exemplo, para $m = 3$ os campos primários têm pesos

$$(h_{(1,1)}, \bar{h}_{(1,1)}) = (0, 0) \quad (h_{(2,1)}, \bar{h}_{(2,1)}) = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad (h_{(1,2)}, \bar{h}_{(1,2)}) = \left(\frac{1}{16}, \frac{1}{16}\right), \quad (1.2.7)$$

com respeito aos campos descendentes, as degenerescências destes também são conhecidas. Os autores da Ref. [44] calcularam tais degenerescências explicitamente, e nós apresentamo-las na Tabela 1.2, para $1 \leq j \leq 15$.

Outro caso de interesse é $c = 1$, para o qual temos infinitos pesos conformes. Estes pesos, por sua vez, são dados por [36]

$$h_{(Q,\beta)} = \frac{1}{2} \left(\frac{Q}{R} + \frac{\beta R}{2} \right)^2 \quad \bar{h}_{(Q,\beta)} = \frac{1}{2} \left(\frac{Q}{R} - \frac{\beta R}{2} \right)^2, \quad (1.2.8)$$

sendo R o raio de compactação.⁵ E os valores de Q e β dependem do modelo, para o modelo gaussiano, bem como para a cadeia de Heisenberg XXZ, tem-se $Q, \beta \in \mathbb{Z}$ [36, 45–47]. Uma vez que as dimensões de escala e os *spins* devem obedecer à Eq. (1.2.4), estes são então dados por

$$\Delta_{(Q,\beta)} = \frac{Q^2}{R^2} + \frac{\beta^2 R^2}{4} \quad s_{(Q,\beta)} = Q\beta. \quad (1.2.9)$$

Estas dimensões são bastante similares às do modelo gaussiano derivadas por Kadanoff e Brown [46, 47]. Outros valores de c também são encontrados, embora não sejam considerados no presente trabalho.

1.3 O conceito de emaranhamento

O conceito de emaranhamento foi introduzido em 1935, quando Schrödinger usou o termo pela primeira vez em uma série de três artigos [48]. Nesta mesma época Einstein, Podolsky e Rosen

⁵O valor de R depende do modelo considerado e está relacionado com as interações. No caso do modelo de Heisenberg XXZ $1/R^2 = \Delta_\sigma$, sendo Δ_σ a dimensão de escala do operador magnetização [45].

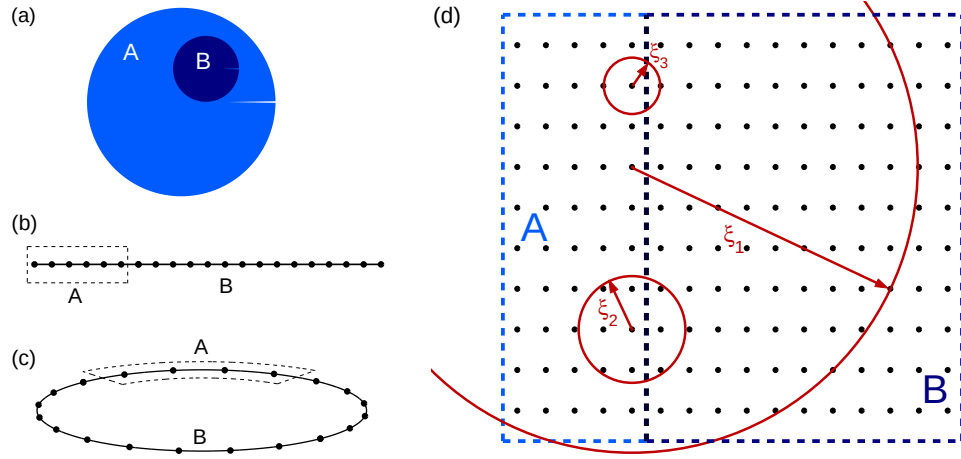


Figura 1.3.1: Ilustração de sistemas quânticos bipartidos contendo os subsistemas $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$. (a) Sistema genérico. (b) e (c) Cadeia unidimensional com condição de contorno aberta e periódica, respectivamente (d) Rede retangular e três possíveis comprimentos de correlação diferentes; $\xi_3 \sim a$, $\xi_2 \gtrsim a$ e $\xi_1 \gg a$. Tendo em vista que graus de liberdade dentro do círculo de raio ξ_n ($n = 1, 2, 3$) estão correlacionados, a informação compartilhada (entropia de emaranhamento) entre os subsistemas será tão maior quanto ξ_n for maior. Consequentemente, para ξ_1 e ξ_2 os subsistemas compartilham informação apenas entre os graus de liberdade em torno da linha que separa os subsistemas, de modo que a Lei Entrópica da Área deve ser válida. Diferentemente, para $\xi_1 \rightarrow \infty$, em um sistema de tamanho *infinito* (ou $a \rightarrow 0$), devemos esperar uma violação da Lei Entrópica da Área, visto que, os subsistemas estão emaranhados não apenas entre os graus de liberdade próximos à linha separadora. Ou melhor, haverá uma divergência da entropia de emaranhamento pois há informação sendo compartilhada entre um grau de liberdade de um dado subsistema com *toda a extensão* do outro subsistema [ver também Figura 3.1.1(b)].

discutiam seu famoso “experimento mental” (*gedankenexperiment*) envolvendo duas partículas relativamente distantes, no qual uma medida no estado de uma partícula tem efeito instantâneo no estado da outra partícula, independentemente da distância entre as partes. Como discutiremos mais adiante, o emaranhamento está conectado com o comportamento do estado quântico, bem como com a informação contida na função de onda. Apesar de, durante muitos anos, o emaranhamento ter sido discutido, principalmente, no campo da óptica quântica, e para sistemas com poucos graus de liberdade, recentemente tem sido de interesse a formulação/aplicação de medidas de emaranhamento para sistemas com muitos graus de liberdade, como as cadeias quânticas de *spins*.

Considere um sistema quântico descrito pelo estado $|\Psi\rangle$, o sistema é então dividido em duas partes $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ [ver Figuras 1.3.1(a) - (c)]. Sejam $|\Psi_m^{\mathcal{A}}\rangle$ e $|\Psi_n^{\mathcal{B}}\rangle$ bases ortonormais nos espaços de Hilbert $\mathcal{H}^{\mathcal{A}}$ e $\mathcal{H}^{\mathcal{B}}$. Então podemos escrever

$$|\Psi\rangle = \sum_{m,n} A_{m,n} |\Psi_m^{\mathcal{A}}\rangle \otimes |\Psi_n^{\mathcal{B}}\rangle, \quad (1.3.1)$$

sendo a matriz A , cujos elementos são $A_{m,n}$, em geral retangular, pois as dimensões dos espaços de Hilbert dos subsistemas podem ser diferentes ($m = 1, \dots, M$ e $n = 1, \dots, N$). O estado $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$ é dito emaranhado se ele *não* pode ser escrito como um produto tensorial dos estados de cada subsistema, i.e., $|\Psi\rangle \neq (\sum_m a_m |\Psi_m^A\rangle) \otimes (\sum_n b_n |\Psi_n^B\rangle)$. Tipicamente, o estado fundamental de diversos sistemas quânticos de muitos corpos consiste de uma enorme sobreposição de estados produtos, sendo portanto emaranhados. Em contra partida, quando, por exemplo, um intenso campo magnético atua sobre um sistema de *spins*, este campo alinha os *spins* ao longo de sua direção, resultando no estado produto ferromagnético (não emaranhado), isto será verificado explicitamente no Capítulo 2 para o modelo de Ising em um campo transversal.

É útil obtermos uma forma “diagonal” para a matriz A . Isto é feito através da decomposição do valor-singular $A = UDV$, sendo U uma matriz quadrada e unitária ($M \times M$), D uma matriz diagonal ($M \times M$) e V uma matriz retangular ($M \times N$) com linhas ortonormais.⁶ Seja $\lambda_n = D_{n,n}$, então temos

$$|\Psi\rangle = \sum_{m,n,k} U_{m,k} \lambda_k V_{k,n} |\Psi_m^A\rangle \otimes |\Psi_n^B\rangle,$$

da qual obtemos a famosa decomposição de Schmidt [51]

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^M \lambda_k |\Phi_k^A\rangle \otimes |\Phi_k^B\rangle, \quad (1.3.2)$$

sendo $|\Phi_k^A\rangle = \sum_{m=1}^M U_{m,k} |\Psi_m^A\rangle$ e $|\Phi_k^B\rangle = \sum_{n=1}^N V_{k,n} |\Psi_n^B\rangle$. Expressar $|\Psi\rangle$ em termos desta nova base há algumas vantagens, a saber: (i) soma simples; (ii) $|\Phi_m^\alpha\rangle$ são ortonormais em ambas as partes; (iii) $\sum_n |\lambda_n|^2 = 1$. Note que λ_n descreve a estrutura de emaranhamento. Por exemplo, considerando o caso limite $\lambda_1 = 1$ e $\lambda_n = 0$ para $n > 1$, temos apenas um termo na soma da Eq. (1.3.2), que corresponde a um estado produto, i.e., um estado *não emaranhado*. Por outro lado, se $\lambda_n = 1/M$ para todo n (supondo $M \leq N$, sem perda de generalidade), temos todos os termos com o mesmo peso, e portanto um *máximo emaranhamento*.

Como é bem sabido, um método alternativo, e matematicamente equivalente à formulação da mecânica quântica em termos de estados vetores, é usar o operador densidade [52], definido por

$$\rho = |\Psi\rangle \langle \Psi|. \quad (1.3.3)$$

Expressando $|\Psi\rangle$ na forma de Schmidt temos

$$\rho = \sum_{n,n'} \lambda_n \lambda_{n'}^* |\Phi_n^A, \Phi_n^B\rangle \langle \Phi_{n'}, \Phi_{n'}^B|.$$

⁶É possível mostrar que para qualquer matriz retangular é sempre possível fazer tal decomposição [49] (veja também a Ref. [50] para uma revisão histórica da decomposição do valor-singular).

Uma vez que estamos interessados em um sistema bipartido, precisamos de uma ferramenta que descreva individualmente cada subsistema do sistema composto. Tal descrição é obtida através da matriz de densidade reduzida, definida por [52]

$$\rho_{\mathcal{A}} = \text{Tr}_{\mathcal{B}}\rho \text{ e } \rho_{\mathcal{B}} = \text{Tr}_{\mathcal{A}}\rho, \quad (1.3.4)$$

sendo $\text{Tr}_{\mathcal{B}}$ ($\text{Tr}_{\mathcal{A}}$) o operador traço parcial sobre o subsistema $\mathcal{B}$ ($\mathcal{A}$). Desse modo, escolhendo um dos subsistemas, toda a informação sobre esta parte pode ser obtida traçando sobre os graus de liberdade da outra parte. Para o subsistema $\mathcal{A}$ temos, por exemplo, $\rho_{\mathcal{A}} = \text{Tr}_{\mathcal{B}}\rho = \sum_m \langle \Phi_m^{\mathcal{B}} | \rho | \Phi_m^{\mathcal{B}} \rangle$. Assim

$$\rho_{\alpha} = \sum_m |\lambda_m|^2 |\Phi_m^{\alpha}\rangle \langle \Phi_m^{\alpha}|, \quad \alpha = \mathcal{A}, \mathcal{B}, \quad (1.3.5)$$

da qual extraímos duas observações importantes: (i) o espectro de autovalores das matrizes de densidade reduzidas fornece diretamente o peso na decomposição de Schmidt, reafirmando a conexão entre a função de onda e o emaranhamento. E ainda, estes autovalores $|\lambda_m|^2 = p_m$ podem, obviamente, ser visualizados com probabilidades; (ii) uma vez que ρ_{α} é hermitiana e seus autovalores são positivos podemos escrever:

$$\rho_{\alpha} = \frac{e^{-\mathcal{H}_{\alpha}}}{Z}, \quad (1.3.6)$$

sendo Z uma constante. O operador $\mathcal{H}_{\alpha}$ é comumente chamado “hamiltoniana de emaranhamento”.

Uma questão óbvia aqui é: na definição (1.3.4), por que é o traço parcial usado para descrever parte de um sistema? A fim de analisar esta questão considere um operador $O_{\mathcal{A}}$ que atua no subsistema $\mathcal{A}$, e O o observável da mesma medida no sistema inteiro, i.e., $O = O_{\mathcal{A}} \otimes \mathbb{1}_{\mathcal{B}}$. Calculando o valor médio de O temos $\langle O \rangle = \text{Tr}(O\rho) = \text{Tr}(O_{\mathcal{A}} \otimes \mathbb{1}_{\mathcal{B}}\rho)$, que deve ser igual a $\langle O_{\mathcal{A}} \rangle = \text{Tr}_{\mathcal{A}}(O_{\mathcal{A}}\rho_{\mathcal{A}})$, que é satisfeito escolhendo $\rho_{\mathcal{A}} = \text{Tr}_{\mathcal{B}}\rho$. A prova da unicidade desta solução pode ser encontrada, por exemplo, na Ref. [53].

Apesar do completo espectro da matriz de densidade dar claramente a assinatura do emaranhamento em sistemas bipartidos, é também desejável termos uma medida simples através de um número. Na última década diversas medidas de emaranhamento têm sido propostas e calculadas para o estado fundamental de diversos sistemas de muitos corpos [22]. No que diz respeito aos estados excitados pouca atenção foi devotada às suas propriedades de emaranhamento até o presente. Mesmo para o estado fundamental, para o qual uma larga investigação já foi feita, ainda não existe um consenso sobre a medida correta do emaranhamento no caso de um estado misto. A entropia de emaranhamento é, sem dúvida, a quantidade mais comumente calculada a fim de quantificar o emaranhamento. Ela é definida como a entropia de von Neumann, dada por

$$S_1(\mathcal{A}) = -\text{Tr}_{\mathcal{A}}(\rho_{\mathcal{A}} \log \rho_{\mathcal{A}}) = -\sum_n p_n \log p_n, \quad (1.3.7)$$

e analogamente para $\mathcal{B}$. Esta é a medida de emaranhamento padrão em sistemas bipartidos e é definida generalizando a entropia de Shannon (associada à incerteza de uma distribuição de probabilidade clássica) para estados quânticos.⁷ A entropia de von Neumann tem as seguintes propriedades: (i) $S_1(\mathcal{A}) = S_1(\mathcal{B})$, fisicamente, a entropia de emaranhamento não é uma medida relativa ao estado de um dos subsistemas e sim do estado do sistema inteiro, medindo como os subsistemas são inter-relacionados; (ii) $S_1 = 0$ para estados separáveis; (iii) S_1 é máximo se todos os p_n são iguais, se $p_n = 1/M$ para $n = 1, \dots, M$ então $S_1 = \log M$. Uma simples interpretação segue desta última propriedade, escrevendo $S_1 = \log M_{\text{eff}}$, então $M_{\text{eff}} = e^{S_1}$ é o número efetivo de estados na decomposição de Schmidt. Uma observação importante aqui é que, em geral, a entropia de emaranhamento não é proporcional ao tamanho de um subsistema como a usual entropia termodinâmica é.

Consideremos, a nível ilustrativo, um simples sistema composto de dois *spins*-1/2 no estado $|\Psi_1\rangle = a|\uparrow\uparrow\rangle + b|\uparrow\downarrow\rangle + c|\downarrow\uparrow\rangle$, que apesar de ser em geral emaranhado, não está na forma de Schmidt [Eq. (1.3.2)], pois $|\Psi_1\rangle = |\uparrow\rangle_{\mathcal{A}}(a|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}} + b|\downarrow\rangle_{\mathcal{B}}) + c|\downarrow\rangle_{\mathcal{A}}|\uparrow\rangle_{\mathcal{B}}$, e portanto os estados no subsistema $\mathcal{B}$ são não ortogonais, para $a \neq 0$. Por outro lado, se o sistema está no estado $|\Psi_2\rangle = \cos\theta|\uparrow\downarrow\rangle + \sin\theta|\downarrow\uparrow\rangle$, a entropia de emaranhamento $S_1(\mathcal{A})$ toma seu valor máximo $\log 2$ quando $\cos^2\theta = 1/2$, que coincide com a ideia intuitiva de emaranhamento.

Uma outra medida bastante usada para quantificar o emaranhamento é a entropia de Rényi definida como

$$S_n(\mathcal{A}) = \frac{1}{1-n} \log(\text{Tr}_{\mathcal{A}} \rho_{\mathcal{A}}^n), \quad (1.3.8)$$

sendo a entropia de emaranhamento o limite $n \rightarrow 1$, que possui os mesmos extremos da entropia de von Neumann e também é uma medida da correlação mútua entre os subsistemas.

1.4 A entropia de emaranhamento em sistemas unidimensionais

Retornando agora a nossa atenção a um sistema de muitos corpos, em particular àqueles cujos graus de liberdade são de *spins*. Considere um sistema *unidimensional* de comprimento L , dividido em dois intervalos $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ de tamanhos ℓ e $L - \ell$, respectivamente. Tipicamente, a entropia de emaranhamento $S_1(\ell, L)$ assume dois comportamentos distintos, dependendo da hamiltoniana (e de seus acoplamentos) que descreve o sistema. Para sistemas não críticos, hamiltoniana com um *gap*, a entropia de emaranhamento geralmente tende a um valor finito

⁷Apesar de no campo da informação quântica usualmente ser usada a base 2 para o logaritmo, na definição (1.3.7) bem como em toda parte desta dissertação “log” representa o logaritmo na base e , i.e., o logaritmo natural. Não há nada com o que se preocupar com esta definição, uma vez que essa base simplesmente define a unidade de medida, a exemplo na base 2 a entropia é medida em unidades de informação ou bits.

à medida que ℓ aumenta. Tal comportamento está de acordo com a Lei Entrópica da Área, a qual diz que a entropia é proporcional à área da superfície que separa os subsistemas [54, 55] (ver Seções 1.3 e 1.4, e também a Ref. [27]). Ou seja, para um sistema de dimensão d deveríamos esperar que $S_1(\ell) \sim \ell^{d-1}$, entretanto, próximos de pontos críticos (transições de fase de segunda ordem), violações desta lei têm sido severamente observadas, como explicitaremos, para $d = 1$, a seguir.⁸ De fato, a entropia diverge quando o sistema se aproxima de tais pontos. Lembrando que, próximos a um ponto crítico, o comprimento de correlação torna-se muito maior que o espaçamento de rede a , e no ponto crítico $\xi^{-1} = 0$, é evidente que a informação compartilhada pelos subsistemas vai além dos graus de liberdade próximos da área que os separam. Curiosamente, a divergência na entropia de emaranhamento comporta-se como uma lei universal, para o estado fundamental de um subsistema de tamanho ℓ em um sistema infinito ela foi calculada pela primeira vez por Holzhey *et al.* [64] e chamada neste caso de entropia geométrica (veja também as Refs. [21, 24, 65]). O resultado assintótico encontrado foi

$$S_1^{\text{CFT}}(\ell) \sim \frac{c}{3} \log \frac{\ell}{a}, \quad (1.4.1)$$

note que a partir da entropia de von Neumann é então possível localizar os pontos críticos e determinar sua carga central c (assinatura do ponto crítico), sem o conhecimento da velocidade do som [ver Eq. (1.2.1)].

No caso do sistema ser finito, mas no regime de escala $L \gg \ell \gg 1$, devemos substituir $\ell \rightarrow \frac{L}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{L}\ell\right)$, levando a [23, 24, 66, 67]

$$S_1^{\text{CFT}}(L, \ell) = \eta \frac{c}{6} \log \left[\frac{L}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{L}\ell\right) \right] + c'_1 + 2g, \quad (1.4.2)$$

sendo η o número de pontos de contato entre o subsistema e o restante da cadeia, i.e., $\eta = 1(2)$ para sistemas com condição de contorno aberta (periódica) [veja Figuras 1.3.1(b) e (c)], $g = 0$ para PBC, e fixamos o parâmetro de rede $a = 1$. Uma detalhada/útil discussão do comportamento da entropia de emaranhamento em diversos sistemas solúveis de muitos corpos pode ser encontrada nas Refs. [68, 69]. Vale a pena salientar que a Eq. (1.4.2), a previsão da CFT, é apenas o termo dominante da entropia de von Neumann. A importância de considerar correções subdominantes à Eq. (1.4.2) foi percebida primeiramente por Laflorie *et al.* [70] em uma cadeia Heisenberg de *spin*-1/2 com condições de contorno aberta (OBC). Eles observaram que fortes oscilações apareciam na entropia de von Neumann, dessa forma, o comportamento de S_1 não é suficientemente descrito pela Eq. (1.4.2), pois esta não prevê nenhuma oscilação. A origem destas oscilações não é ainda completamente entendida, contudo, elas parecem ter suas

⁸Existem evidências de que a Lei Entrópica da Área é também violada em sistemas críticos com dimensão $d > 1$. Nas Refs. [27, 56–63] pode-se encontrar diversos exemplos para os quais tal violação foi verificada.

origens no caráter antiferromagnético da hamiltoniana. Tais oscilações, em sistemas com OBC, foram então observadas por diversos outros autores [71–73].

Semelhantemente à entropia de von Neumann, as entropias de Rényi também apresentam um elegante e universal comportamento, constituindo então uma poderosa ferramenta para descrever as propriedades universais de transições de fase quântica. Em geral, no regime de escala $L \gg \ell \gg 1$ é esperado em sistemas críticos, com PBC, que a entropia de Rényi do estado fundamental comporte-se como

$$S_n(L, \ell) = S_n^{\text{CFT}}(L, \ell) + S_n^{\text{OSC}}(L, \ell). \quad (1.4.3)$$

O primeiro termo é a predição da CFT governada pela carga central c , e tem a forma universal [23, 24, 64, 66, 67]

$$S_n^{\text{CFT}}(L, \ell) = \left(1 + \frac{1}{n}\right) \frac{c}{6} \log \left[\frac{L}{\pi} \sin \left(\frac{\pi}{L} \ell \right) \right] + c'_n, \quad (1.4.4)$$

sendo c'_n constantes não universais.

Calabrese *et al.* [72] estudaram a cadeia de Heisenberg de $spin-1/2$ anisotrópica com PBC e eles notaram que, apesar de não haver oscilações na entropia de von Neumann, elas ainda estão presentes para as entropias de Rényi com $n > 1$. Finalmente, foi conjecturado por Xavier e Alcaraz [74], baseados na investigação de vários modelos com PBC que: (i) a entropia de von Neumann, para intervalos únicos (i.e., para sistemas bipartidos), não deve apresentar oscilações;⁹ (ii) para modelos contendo pelo menos uma simetria contínua, espera-se oscilações na entropia de Rényi para índices $n > 1$; (iii) modelos que possuem apenas simetrias discretas não apresentam oscilações para qualquer índice n .

Embasados em resultados numéricos e exatos da cadeia XXZ de $spin-1/2$ com campo nulo, Calabrese e colaboradores propuseram então um comportamento universal (exceto por outra constante não universal) para o termo subdominante $S_n^{\text{OSC}}(L, \ell)$ [72, 73, 75, 76]

$$S_n^{\text{OSC}}(L, \ell) = \frac{a_1 \delta_{n,1} + g_n (1 - \delta_{n,1}) \cos(\kappa \ell + \theta)}{\left| L \sin \left(\frac{\pi}{L} \ell \right) \right|^{p_n}}, \quad (1.4.5)$$

sendo p_n um novo expoente crítico que governa este termo, e a_1 e g_n são constantes não universais. O número de onda κ e a fase θ dependem do modelo e seus parâmetros. Por exemplo, para o modelo de Ising $\kappa = 0 = \theta$, e não se observa nenhuma oscilação. Enquanto que para as cadeias XXZ de $spin-s$ em campo nulo $\kappa = \pi$ e $\theta = 0$ [71]. O fator oscilante $[\cos(\kappa \ell + \theta)]$ tem sido observado em sistemas cujas correlações de $spin$ apresentam um comportamento oscilatório, todavia é uma questão ainda não muito bem entendida.

⁹Como veremos no Capítulo 4 esta conjectura não se aplica a sistemas que são descritos por CFT com dois modos de *gap*-nulo [30].

A observação de correções não usuais na entropia com os expoentes da Eq. (1.4.5) foram confirmadas em alguns modelos. Este expoente está relacionado com a dimensão de escala Δ_{con} de um operador da CFT subjacente por $p_n = 2\Delta_{\text{con}}/n$ [77]. Existem evidências de que, para a entropia de intervalos únicos, $\Delta_{\text{con}} = \Delta_\epsilon$, sendo Δ_ϵ a dimensão de escala do operador energia do modelo [74] para $n > 1$, e $p_1 = 2$ para todos os modelos (universal) [72, 74, 78].¹⁰

Finalmente, uma questão frequentemente levantada no ramo da física refere-se aos resultados e/ou comparações experimentais, que é dito ser o cheque final e/ou objetivo de toda teoria. Infelizmente, a não localidade da entropia de emaranhamento torna qualquer tentativa de uma medida experimental bastante difícil, uma vez que o processo de medida deveria acessar simultaneamente todos os graus de liberdade no sistema de muitos corpos. Por exemplo, recentemente, Klich e Levitov propuseram um experimento realista no âmbito de *quenches* locais em sistemas que possam ser mapeados em cadeias de *férmions não interagentes* [79]. A ideia principal deles foi a de como relacionar a entropia de emaranhamento entre duas metades de uma cadeia com a distribuição de elétrons passando através do contato entre as cadeias. O *quench* local considerado foi: toma-se duas cadeias semi-infinitas inicialmente desacopladas e então em algum tempo t_0 estabelece-se a conexão entre elas, permitindo assim a passagem dos elétrons, de modo que, esta medida dinâmica (flutuação no número de elétrons), dá uma medida da entropia de emaranhamento. Entretanto, a generalidade deste método, bem como sua conexão direta com o *emaranhamento estático* têm sido questionadas, e com isso ideias alternativas têm sido propostas [80, 81].

No restante desta seção vamos explorar o comportamento da entropia de Rényi de estados excitados. Conforme enfatizado na Seção 1.2 as correções de tamanho finito no espectro de energia, nos pontos críticos de sistemas unidimensionais, têm uma estrutura universal [veja Eqs. (1.2.1) - (1.2.4)]. E ainda, cada classe de universalidade é quantificada por um número, a carga central c . Além do mais, cada estado excitado no espectro de energia exibe energia e momento determinados pelos pesos conformes. Por exemplo, para um sistema crítico, um estado excitado que seja associado com um operador primário $\varphi_{(n)} = \Upsilon$, de peso conforme h , possui um excesso de energia com respeito ao estado fundamental igual a $2\pi\Delta/L$ (sendo $\Delta = h + \bar{h}$ a dimensão de escala do operador primário em questão). Contudo este excesso desaparece no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$. De modo que podemos nos perguntar se a entropia dos menores estados excitados também coincide com a entropia do estado fundamental no limite termodinâmico.

Na Ref. [28, 29] foi provado que as entropias de Rényi de um estado excitado, definido por um operador primário, são também universalmente relacionadas com as propriedades conformes

¹⁰Desse modo, pode-se determinar um expoente crítico (associado à correção de tamanho finito de um estado excitado de energia) através da correção de tamanho finito do estado fundamental das entropias de Rényi.

do operador que define a excitação. Isto é, as entropias de estados excitados também apresentam um comportamento universal, e este comportamento depende da particularidade da excitação estudada. Entretanto, ao contrário das correções de tamanho finito das energias, cujas precisão e eficácia na determinação das propriedades críticas de um sistema são comprovadas por inúmeros trabalhos, o emaranhamento de estados excitados é um campo bastante novo, que foi considerado por apenas alguns autores até o presente [25, 28–30, 82–87].

A fim de entendermos o emaranhamento de estados excitados, definimos S_n^Υ como a entropia de Rényi associada com uma excitação de um operador Υ , de peso conforme h , de modo que a ação de Υ no estado fundamental leva-o ao estado excitado desejado. É útil definirmos também

$$\log F_n^\Upsilon = (1 - n) [S_n^\Upsilon(L, \ell) - S_n^{\text{GS}}(L, \ell)], \quad (1.4.6)$$

sendo $S_n^{\text{GS}} = S_n^{\mathbb{1}}$ a entropia do estado fundamental, e $\mathbb{1}$ o operador identidade. Deste modo a quantidade $F_n^\Upsilon(L, \ell)$ quantifica o excesso de entropia $\Delta S_n = S_n^\Upsilon(L, \ell) - S_n^{\text{GS}}(L, \ell)$ do estado $|\Upsilon\rangle$ com respeito ao estado fundamental (GS). Esta quantidade está relacionada com a correlação de $2n$ -pontos do operador Υ , para operadores primários, e seu conjugado por [28, 29]

$$F_n^\Upsilon(L, \ell) = n^{-2n(h+\bar{h})} \frac{\left\langle \prod_{j=0}^{n-1} \Upsilon\left(\frac{2\pi}{n}j\right) \Upsilon^\dagger\left[\frac{2\pi}{n}\left(j + \frac{\ell}{L}\right)\right] \right\rangle}{\left\langle \Upsilon(0) \Upsilon^\dagger\left(\frac{2\pi}{n}\frac{\ell}{L}\right) \right\rangle^n}. \quad (1.4.7)$$

F_n^Υ é uma função universal dependente do operador primário Υ , para n geral e no limite $\ell/L \ll 1$ foi mostrado, expandindo $\Upsilon\Upsilon^\dagger$, que [28]

$$F_n^\Upsilon(\ell, L) \sim 1 + \frac{d^\Upsilon}{3} \left(\frac{1}{n} - n\right) \left(\frac{\pi\ell}{L}\right)^2 + o\left(\frac{\ell^2}{L^2}\right) \cdots, \quad (1.4.8)$$

sendo d^Υ a dimensão de escala do operador Υ .¹¹ A entropia de emaranhamento pode então ser calculada notando que da definição (1.4.6) tem-se $\Delta S_1(\ell, L) = -\partial_n F_n^\Upsilon|_{n=1}$, e portanto

$$\Delta S_1 = \frac{2\pi^2}{3} d^\Upsilon \left(\frac{\ell}{L}\right)^2 + o\left(\frac{\ell^2}{L^2}\right) \cdots, \text{ para } \ell/L \ll 1. \quad (1.4.9)$$

Em particular, para uma teoria de campo bosônico (*massless boson field*), foi encontrado $F_n^\Upsilon(L, \ell) = 1$ [28, 29], no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$, para operadores associados com excitações *compactas*, i.e., aquelas que, assim como o estado fundamental, não exibem buracos no espaço dos momentos.¹² Portanto no limite termodinâmico a entropia destas excitações é

¹¹Conforme discutiremos nos próximos capítulos (veja também Ref. [30]) nossa interpretação do “coeficiente” d^Υ difere da proposta original de Alcaraz *et al.* [28].

¹²Não há contradição com a Eq. (1.4.8), neste caso aparecem termos da ordem de $(\ell/L)^2$ que cancelam o termo de mesma ordem mostrado na Eq. (1.4.8), de fato este cancelamento ocorrerá para todas as ordens.

igual à entropia do estado fundamental, i.e., $S_n^\Upsilon = S_n^{\text{GS}}$. Para sistemas finitos, vamos verificar com exemplos nos Capítulos 3 e 4 que S_n^{GS} e S_n^Υ , para excitações compactas, diferem apenas por oscilações não usuais, de modo que o termo dominante de S_n^Υ também obedece à lei universal (1.4.4). Por outro lado, Alcaraz *et al.* [28, 29] perceberam que as excitações *não-compactas*, i.e., aquelas com buracos no espaço de momentos, são tais que suas entropias são maiores do que a entropia do estado fundamental, $\Delta S_n = S_n^\Upsilon - S_n^{\text{GS}} \geq 0$. Foi considerado o operador primário $\Upsilon = i\partial\phi$ (usualmente o estado $|i\partial\phi\rangle$ é chamado de partícula-buraco) e mostrado que a função universal $F_n^{i\partial\phi}$ é dada por [28, 29]

$$F_n^{i\partial\phi} = \left[\frac{2i}{n} \sin\left(\frac{\pi\ell}{L}\right) \right]^{2n} \det \mathbb{M}, \quad (1.4.10)$$

sendo $\mathbb{M}$ uma matriz $2n \times 2n$ com elementos

$$\mathbb{M}_{j,k} = \begin{cases} (e^{iz_j} - e^{iz_k})^{-1} & \text{se } j \neq k \\ 0 & \text{se } j = k \end{cases} \quad \text{e} \quad z_j = \begin{cases} \pi(2j - 2 + \ell/L)/n & \text{se } j \leq k \\ \pi(2j - 2 - \ell/L)/n & \text{se } j > k \end{cases}. \quad (1.4.11)$$

Em particular para $n = 2$ temos

$$F_2^{i\partial\phi} = 1 - 2x^2 + 3x^4 - 2x^6 + x^8, \quad (1.4.12)$$

com $x = \sin(\pi\ell/2L)$.¹³ Para maiores valores de n as Eqs. (1.4.10) - (1.4.11) tornam-se tão extensas que não vale a pena escrevê-las. Verificaremos a veracidade das previsões acima [Eqs. (1.4.8) - (1.4.12)] para a quantidade $F_n^\Upsilon(L, \ell)$ para exemplos em sistemas finitos nos Capítulos 3 e 4, nos quais, em alguns casos, oscilações não usuais também aparecem.

¹³Que pode ser simplificada como $F_2^{i\partial\phi} = \left[\frac{7 + \cos(2\pi\ell/L)}{8} \right]^2$.

Capítulo 2

Solução exata e propriedade críticas do modelo XY

O modelo XY unidimensional em um campo magnético transversal tem sido extensivamente estudado durante décadas com o objetivo de entender o comportamento universal de sistemas em baixa dimensão. Sua hamiltoniana descreve *spins*-1/2 nos sítios de uma cadeia com interação de troca de primeiros vizinhos, esta interação é confinada no plano *xy* do espaço de *spins*, enquanto que o campo externo é aplicado na direção *z*. Apesar de sua aparente simplicidade, o modelo XY possui um interessante diagrama de fases à temperatura nula, caracterizado por duas transições de fase: (i) uma pertencente à classe de universalidade do modelo de Heisenberg *spin*-1/2 crítico (modelo XX); (ii) e outra é a transição de fase do modelo Ising quântico unidimensional. Em anos recentes o interesse no modelo XY foi renovado, principalmente porque várias previsões do comportamento da entropia de emaranhamento podem ser verificadas de modo exato neste modelo. Vale a pena salientar que foi encontrado, recentemente, uma realização experimental do modelo XY anisotrópico unidimensional em uma cadeia do composto Tb(III)-W(V) (ver Figura 2.0.1). Os autores da Ref. [88] descreveram o comportamento magnético deste composto em termos das previsões teóricas do modelo XY com um excelente acordo.

Neste Capítulo, será discutido a solução exata da hamiltoniana do modelo XY em um campo transversal, que será definida posteriormente. Iremos determinar os pontos críticos do modelo, bem como seu diagrama de fases. Em seguida, na Seção 2.2 encontraremos as correções de tamanho finito da energia do estado fundamental e dos estados excitados nestes pontos, como consequência encontraremos a carga central *c* e as dimensões de escala .

A hamiltoniana do modelo XY pode ser escrita como [12]:

$$\hat{H}_{XY} = - \sum_{n=1}^L [(1 + \gamma) s_n^x s_{n+1}^x + (1 - \gamma) s_n^y s_{n+1}^y] - h \hat{S}^z, \quad (2.0.1)$$

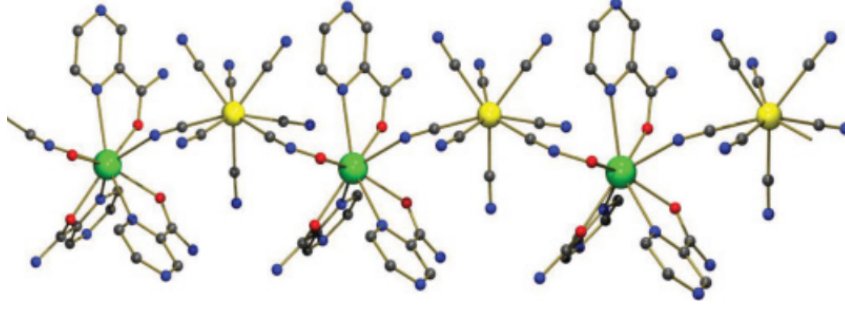


Figura 2.0.1: Representação esquemática da cadeia unidimensional de $[\text{Tb}(\text{pzam})_3(\text{H}_2\text{O})\text{M}(\text{CN})_8] \cdot \text{H}_2\text{O}$, sendo $\text{M}=\text{Mo}$ (Molibdênio) e W (Tungstênio), que é uma realização experimental no modelo XY anisotrópico. Átomos de hidrogênio e moléculas de água foram omitidas. Tb (Térbio): verde; M: amarelo; O: vermelho; N: azul; C: cinza. Esta figura foi retirada da Ref. [88].

sendo s_n^α ($\alpha = x, y, z$) os operadores de spin-1/2 no n -ésimo sítio da cadeia, $\hat{s}^z = \sum_n s_n^z$ a componente do *spin* total na direção do campo magnético externo h , e γ o parâmetro de anisotropia. Note que o operador $\hat{s}^z$ comuta com $\hat{H}_{XY}$, razão pela qual os autoestados de $\hat{H}_{XY}$ podem ser rotulados pelos autovalores de $\hat{s}^z$, a saber $\{-\frac{L}{2}, -\frac{L}{2} + 1, \dots, \frac{L}{2}\}$. A quantidade $m = \langle \hat{s}^z \rangle / L$ é magnetização por sítio. Concentrar-nos-emos aqui apenas no caso $h, \gamma \geq 0$ e investigaremos o modelo acima sob PBC.

2.1 Diagonalização exata e diagrama de fases

Nesta seção vamos diagonalizar a hamiltoniana do modelo XY. Para tanto, introduzimos operadores fermiônicos através da seguinte transformação de Jordan-Wigner [10]:

$$c_m = (s_m^x - i s_m^y) \prod_{n < m} (-2 s_n^z). \quad (2.1.1)$$

Note que estes operadores obedecem à álgebra fermiônica:

$$c_m^2 = 0, \quad \{c_m, c_n\} = 0 \text{ e } \{c_m^\dagger, c_n\} = \delta_{m,n}. \quad (2.1.2)$$

Em termos destes operadores a hamiltoniana (2.0.1) toma a forma

$$\hat{H}_{XY} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{L-1} \left(c_n^\dagger c_{n+1} + \gamma c_n^\dagger c_{n+1}^\dagger + \text{h.c.} \right) - e^{i\pi \hat{\mathcal{N}}} \left(c_L^\dagger c_1 + c_L^\dagger c_1^\dagger + \text{h.c.} \right) - h \hat{\mathcal{N}} + \frac{hL}{2} \mathbb{1}, \quad (2.1.3)$$

sendo $\hat{\mathcal{N}} = \sum_n c_n^\dagger c_n$ o operador número, cujos autovetores $\mathcal{N}$ são $\{0, 1, \dots, L\}$. Observe que este operador também comuta com a hamiltoniana. Comparando esta hamiltoniana à hamiltoniana

biquadrática geral em operadores fermiônicos do Apêndice [Eq. (A.0.1)], vemos que $\hat{H}_{XY} - \frac{hL}{2}$ é um caso particular com

$$\begin{aligned} A_{n,n} &= -h, & A_{n,n+1} &= -\frac{1}{2}, & A_{L,1} &= -\frac{e^{i\varphi}}{2}, \\ B_{n,n+1} &= \frac{\gamma}{2} & \text{e} & & B_{L,1} &= -e^{i\varphi}\frac{\gamma}{2}, \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

por razões práticas definimos, $\varphi = 0 (\pi)$ se $\mathcal{N}$ é ímpar (par), de modo que temos $c_{L+1} = e^{i\varphi}c_1$. Note que para sistemas com $\mathcal{N}$ ímpar (par) a hamiltoniana (2.1.3) descreve um sistema de férmions não interagentes com condição de contorno periódica (antiperiódica).

Notando que $\sum_m A_{m,m} = -hL$, a forma diagonal de $\hat{H}_{XY}$ é [veja Eq. (A.I.7)]:

$$H_{XY} = \sum_k \Lambda_k \left(\eta_k^\dagger \eta_k - \frac{1}{2} \right), \quad (2.1.5)$$

como mostrado no Apêndice A.I, sendo η_k e Λ_k determinados pela equação de valores próprios $\Phi_k(A - B)(A + B) = \Lambda_k^2 \Phi_k$ [veja Eq. (A.I.8) e os elementos das matrizes A e B são dados pela Eq. (2.1.4)]. Definindo então $\phi_k(L + n) = \phi_k(n)e^{i\varphi}$ podemos escrever esta autoequação como

$$[4h^2 + 2(\gamma^2 + 1) - \Lambda_k^2] \phi_k(n) = 4h [\phi_k(n-1) + \phi_k(n+1)] + (\gamma^2 - 1) [\phi_k(n-2) + \phi_k(n+2)]. \quad (2.1.6)$$

É visível que, um conjunto completo das soluções da equação acima é

$$\phi_k(n) \sim e^{\pm ikn}, \quad (2.1.7)$$

com autovalores

$$\Lambda_k^2 = (h - \cos k)^2 + \gamma^2 \sin^2 k \quad (2.1.8)$$

e $e^{-i(kL-\varphi)} = 1$. Nas Figuras 2.1.1(a) e (b), são ilustrados exemplos da dispersão acima. Restringir-nos-emos apenas ao caso de L par, de modo que $k(n) = \frac{2n\pi+\varphi}{L}$ com n inteiro tal que $n \in (-L/2 + 1, L/2]$.

Perceba que devemos ainda determinar $\psi_k(n)$ tal que $\Phi_k(A - B) = \Lambda_k \Psi_k$ [Eq. (A.I.6)], estes são dados por:

$$\psi_k(n) = \Lambda_k^{-1} (\cos k - h - i\gamma \sin k) \phi_k(n),$$

na qual usamos as matrizes A e B dadas pela Eq. (2.1.4). Por isso, a solução do modelo XY está completa, uma vez que os operadores η_k 's são dados pela transformada de Bogoliubov [Eq. (A.I.2)] em termos de $\phi_k(n)$ e $\psi_k(n)$ que acabamos de determinar.

Nas Figuras 2.1.1(a) e (b) apresentamos a relação de dispersão Λ_k para alguns valores de (γ, h) . Através de uma análise minuciosa destas relações de dispersão [Eq. (2.1.8)] vemos que o modelo possui um *gap* finito para a maioria dos acoplamentos, porém temos excitações com *gap* nulo para $(\gamma = 0 \text{ e } h \leq 1)$ e para $h = 1$. Estas duas linhas críticas são apresentadas na Figura

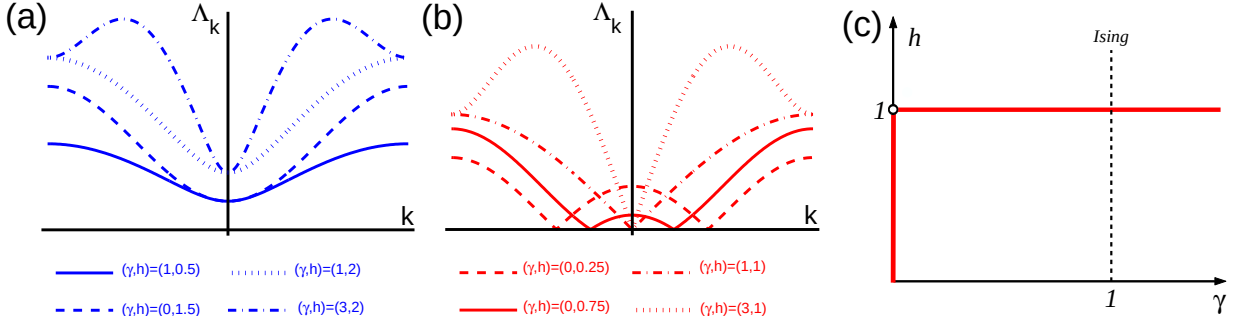


Figura 2.1.1: As figuras (a) e (b) são exemplos da relação de dispersão Λ_k [Eq. (2.1.8)]. Atente que, dependendo dos parâmetros γ e h , a hamiltoniana apresenta *gap* finito [figura (a)] ou *gap* nulo no limite termodinâmico [figura (b)]. Na figura (c) temos o diagrama de fases à temperatura nula da hamiltoniana XY. O sistema é crítico e invariante conforme em ambas as retas vermelhas, ($\gamma = 0$ e $h < 1$) e ($\gamma \neq 0$ e $h = 1$).

2.1.1(c). A classe de comportamento crítico das linhas ($\gamma = 0$ e $h < 1$) e ($\gamma \neq 0$ e $h = 1$) são descritas por CFT's com $c = 1$ e $c = 1/2$, respectivamente.¹

Por meio da diagonalização exata de $\hat{H}_{XY}$ pode-se obter várias propriedades do estado fundamental, bem como dos estados excitados, por exemplo, suas energias, magnetização, correlação de *spin-spin*, etc. Seja Ω o conjunto de momentos $k = k(n)$ ocupados em uma dada distribuição fermiônica. Então um autoestado genérico da hamiltoniana (2.0.1) pode ser escrito como:

$$|\Omega\rangle = \prod_{k \in \Omega} \eta_k^\dagger |\text{vácuo}\rangle, \text{ com energia } E_\Omega = \frac{1}{2} \left(\sum_{k \in \Omega} \Lambda_k - \sum_{k \notin \Omega} \Lambda_k \right), \quad (2.1.9)$$

sendo o vácuo definido como $\eta_k |\text{vácuo}\rangle = 0 \forall k$, i.e., todos os níveis da distribuição fermiônica desocupados.

Como já citado, outra importante quantidade que devemos determinar é o setor de momento do estado, em termos dos operadores fermiônicos este momento é dado por

$$P_\Omega = \sum_{k \in \Omega} k \eta_k^\dagger \eta_k. \quad (2.1.10)$$

Note que para cada um dos 2^L autoestados de $\hat{H}_{XY}$ está associado uma das 2^L possíveis distribuições fermiônicas. Isto implica que existe um mapeamento preciso, um para um, entre a rotulação fermiônica dos estados e os estados de *spin* da hamiltoniana original (2.0.1).

2.2 Propriedades críticas

Nesta seção, a fim de obter as dimensões de escala do modelo XY [veja Eq. (1.2.2)], vamos determinar as correções de tamanho finito da energia. É conveniente analisar cada uma das

¹Note que o ponto $(\gamma, h) = (0, 1)$ foi excluído de ambas as linhas críticas (veja a Nota 2 na pág. 32).

linha críticas apresentadas na Figura 2.1.1(c), separadamente. Portanto, na subseção seguinte vamos analisar o caso $\gamma = 0$, e ulteriormente, na Subseção 2.2.2, examinaremos a linha $h = 1$.

2.2.1 Modelo XX ($\gamma = 0$)

Para o caso isotrópico, $\gamma = 0$, recuperamos o modelo XX, no qual temos $B = 0$ e portanto $\Phi_k \equiv \Psi_k$. Escrevendo então o espectro fermiônico como

$$\Lambda_k = -h - \cos k \quad e^{i(kL - \varphi)} = 1, \quad (2.2.1)$$

a transformação (A.I.2) fica uma simples transformada de Fourier

$$\eta_k = \sum_{j=1}^L \phi_k(j) c_j, \quad (2.2.2)$$

com $\phi_k(j) = \frac{e^{-ikj}}{\sqrt{L}}$. Portanto, a hamiltoniana, em sua forma diagonal, simplifica-se em

$$\hat{H}_{XX} = \sum_k \left(\Lambda_k \eta_k^\dagger \eta_k + \frac{h}{2} \right), \quad (2.2.3)$$

e para uma determinada configuração fermiônica Ω o sistema é descrito por um estado

$$|\Omega\rangle = \prod_{k \in \Omega} \eta_k^\dagger |\text{vácuo}\rangle, \text{ com energia } E_\Omega = \sum_{k \in \Omega} \Lambda_k + \frac{hL}{2}. \quad (2.2.4)$$

Assim, para uma distribuição fermiônica com $\mathcal{N}$ momentos ocupados, a magnetização por sítio é $m = \frac{1}{L} \langle \hat{s}^z \rangle = \frac{1}{L} \left(\frac{2\mathcal{N} - L}{2} \right)$. Definindo a densidade de partículas como $\rho = \mathcal{N}/L$ temos $m = \rho - 1/2$.

Estado fundamental

Seja $\mathcal{N}_F$ o número de partículas do estado fundamental, este estado corresponde então ao preenchimento de todos os níveis, desde a mais baixa energia, até que os $\mathcal{N}_F$ níveis de menores energia estejam ocupados. Por conseguinte, o conjunto de momentos ocupados é $\Omega_{\text{GS}} = \{k(n) = (2n+1)\frac{\pi}{L} \mid n = 0, \pm 1, \dots, \pm (\frac{L}{2} - 1), \frac{L}{2} \text{ \& } \Lambda_k \leq 0\}$. Seja $\rho_F = \mathcal{N}_F/L$ a densidade de partículas do estado fundamental. Por simplicidade, vamos considerar apenas o caso $\mathcal{N}_F$ par. Na Figura 2.2.1(a) representamos a relação de dispersão para o estado fundamental. Logo temos $\Omega_{\text{GS}} = \{\pm \frac{\pi}{L}, \pm \frac{3\pi}{L}, \dots, \pm (\pi\rho_F - \frac{\pi}{L})\}$. Os mais altos níveis ocupados são chamados de *níveis de Fermi*, seus momentos são os *momentos de Fermi* $k_F = \pm (\pi\rho_F - \frac{\pi}{L})$ e suas energias são as *energias de Fermi* $\Lambda_{\pm k_F}$.

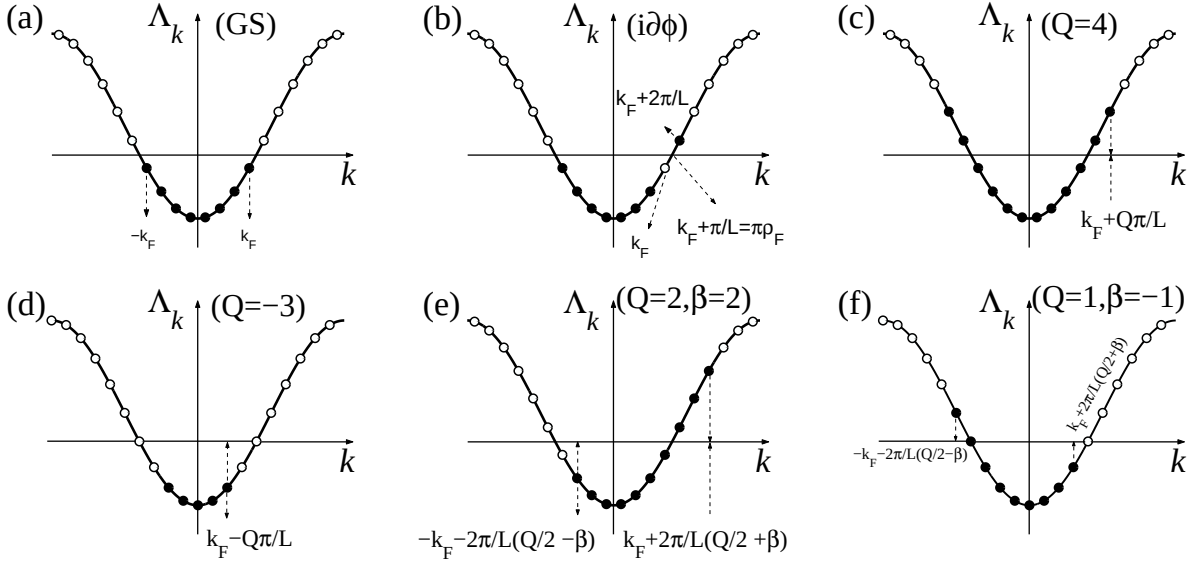


Figura 2.2.1: Relações de dispersão da cadeia XX, os círculos preenchidos (abertos) representam estados ocupados (desocupados). Note que se Q é positivo (negativo) foram adicionadas (removidas) Q partículas simetricamente acima (abaixo) dos pontos de Fermi. (a) Estado fundamental com $\mathcal{N}$ par. (b) Excitação partícula-buraco à direita (R:p-h). (c) Excitação com $Q = 4$ partículas acrescentadas ao estado fundamental. (d) Excitação com $Q = -3$, i.e., removendo três partículas do estado fundamental. (e) Distribuição fermiônica com $Q = 2$ partículas acrescentadas ao estado fundamental e depois removendo $\beta = 2$ partículas do topo do lado esquerdo da dispersão e arranjando-as nos primeiros níveis livres do lado direito. (f) Configuração com $Q = 1$ partícula acrescentada ao estado fundamental e removendo $|\beta| = 1$ partícula do nível mais energético do lado direito e colocando-a no primeiro nível livre do lado esquerdo.

Utilizando a Eq. (2.2.4) o estado fundamental é escrito como

$$|\Omega_{\text{GS}}\rangle = |\mathcal{N}_F\rangle = \prod_{k=\frac{\pi}{L}}^{k_F} \eta_k^\dagger \eta_{-k}^\dagger |\text{vácuo}\rangle, \text{ com energia } E_0 = \sum_{k=-k_F}^{k_F} \Lambda_k + \frac{hL}{2}. \quad (2.2.5)$$

Devido a estrutura simples de Λ_k , esta soma pode ser feita analiticamente, resultando em

$$E_0 = hL \left(\frac{1}{2} - \rho_F \right) - \frac{\sin \pi \rho_F}{L \sin(\pi/L)}.$$

A fim de determinarmos a carga central c , que caracteriza a classe de universalidade de comportamento crítico, expandimos a equação acima. Para $L \gg 1$ obtemos que a energia se comporta como

$$E_0 = hL \left(\frac{1}{2} - \rho_F \right) - \frac{\sin \pi \rho_F}{\pi} \left[L + \frac{\pi^2}{6L} + o(L^{-2}) \right], \quad (2.2.6)$$

comparando esta equação com a Eq. (1.2.1) identificamos:

$$c\nu_s = \sin \pi \rho_F \quad (2.2.7)$$

e $e_\infty = -hm - \frac{\sin\pi\rho_F}{\pi}$, sendo $m = \rho_F - 1/2$ a magnetização total por sítio. Note que, o momento, dado por (2.1.10) é $P = 0$ [veja Figura 2.2.1(a)].²

Estados excitados

Para determinarmos a velocidade do som v_s consideremos agora a menor excitação, com momento não nulo, no setor de magnetização do estado fundamental. Esta excitação é degenerada em energia. Chamaremos esta excitação de partícula-buraco à esquerda L:p-h (direita R:p-h), elas são feitas substituindo o férmion de momento $-k_F$ (k_F) pelo férmion de momento $-k_F - \frac{2\pi}{L}$ ($k_F + \frac{2\pi}{L}$). Na Figura 2.2.1(b), representamos a excitação partícula-buraco à direita (R:p-h). Note que o conjunto de momentos ocupados é $\Omega_{\text{R:p-h}} = \{\pm\frac{\pi}{L}, \dots, \pm(k_F - \frac{2\pi}{L}), -k_F, (k_F + \frac{2\pi}{L})\}$. Analogamente $\Omega_{\text{L:p-h}} = \{\pm\frac{\pi}{L}, \dots, \pm(k_F - \frac{2\pi}{L}), -(k_F + \frac{2\pi}{L}), k_F\}$ são os momentos da excitação partícula-buraco à esquerda (L:p-h). Em termos de uma teoria de bósons livres estas excitações estão associadas com os operadores $i\partial\phi$ e $-i\bar{\partial}\bar{\phi}$ [28, 29, 82]. Suas energias, no limite termodinâmico, são

$$E_{\text{L:p-h}} = E_{\text{R:p-h}} = E_0 + \frac{2\pi\sin\pi\rho_F}{L} + o(L^{-2}). \quad (2.2.8)$$

De acordo com a Eq. (2.1.10) [veja também a Figura 2.2.1(b)] os momentos são

$$P_{\text{L:p-h}} = -\frac{2\pi}{L} \quad \text{e} \quad P_{\text{R:p-h}} = \frac{2\pi}{L}. \quad (2.2.9)$$

Utilizando as Eqs. (2.2.8) e (2.2.9) vemos que $E_{\text{R:p-h}} - E_0 = P_{\text{R:p-h}}\sin\pi\rho_F = P_{\text{R:p-h}}v_s$, de modo que concluímos que $v_s = \sin\pi\rho_F$. No entanto, da Eq. (2.2.7) tínhamos $cv_s = \sin\pi\rho_F$, o que leva a $c = 1$. Subsequentemente, discutiremos que estas duas excitações são provenientes de operadores descendentes.

Outra simples excitação que podemos considerar é adicionar (remover) simetricamente no estado fundamental $|Q|$ partículas nos menores (dos maiores) momentos desocupados (ocupados).³ A menor energia neste setor com $\mathcal{N} = \mathcal{N}_F + Q$ partículas têm o seguinte conjunto de momentos ocupados: $\{\pm\frac{\pi}{L}, \dots, \pm(k_F + \frac{Q\pi}{L})\}$ para Q par e $\{0, \pm\frac{2\pi}{L}, \dots, \pm(k_F + \frac{Q\pi}{L})\}$ para Q ímpar, veja Figuras 2.2.1(c) e (d). De modo que a densidade de partículas destes estados é $\rho = \rho_F + Q/L$, com energias dadas por

$$E_{Q,0}^{0,0} = \sum_{k=-k_F-\frac{Q\pi}{L}}^{k_F+\frac{Q\pi}{L}} \Lambda_k + \frac{hL}{2} = E_0 + \frac{2\pi v_s}{L} \frac{Q^2}{4} + o(L^{-2}),$$

e momentos nulos, ou seja $P = 0$. Na qual usamos que $\Lambda_{\pi\rho_F} = 0$, ou seja o campo magnético é

$$h = -\cos(\pi\rho_F), \quad (2.2.10)$$

²Vale a pena salientar que para $h \equiv 1 \rightarrow \rho_F = 1 \rightarrow v_s = 0$ e portanto $E_0/L = e_\infty + o(L^{-2})$. De modo que, embora a hamiltoniana tenha *gap* nulo, o sistema não é invariante conforme neste ponto.

³ $Q > 0$ ($Q < 0$) se as partículas foram adicionadas (removidas).

e conseqüentemente, e_∞ tem seu valor mínimo, i.e., $\frac{\partial e_\infty}{\partial \rho_F} = 0$.

Existem ainda torres de energia adicionais, estas são obtidas removendo $|\beta|$ partículas a partir dos maiores níveis ocupados na distribuição Q e adicionando estas partículas nos menores níveis permitidos com momento oposto. O sinal positivo (negativo) de β é obtido quando inserimos as partículas em momentos positivos (negativos). Seja $|Q, \beta\rangle$ os autoestados destas excitações, portanto devemos ter

$$|Q, \beta\rangle = \prod_{k=-k_F-\frac{2\pi}{L}(\frac{Q}{2}-\beta)}^{k_F+\frac{2\pi}{L}(\frac{Q}{2}+\beta)} \eta_k^\dagger |\text{vácuo}\rangle, \quad (2.2.11)$$

nas Figuras 2.2.1(e) e (f) ilustramos duas distribuições fermiônicas destas excitações compactas assimétricas. Note que as autoenergias correspondentes a estas excitações são

$$E_{Q,\beta}^{0,0} - E_0 = \frac{2\pi v_s}{L} \left(\frac{Q^2}{4} + \beta^2 \right) + o(L^{-2}),$$

cujo momento, em geral não nulo, é dado por

$$P_{Q,\beta}^{0,0} - P_0 = \frac{2\pi}{L} Q\beta,$$

sendo $P_0 = 2\pi\rho\beta$.

Estes estados são a base de cada uma das torres de energia previstas para um teoria de campos conforme com $c = 1$ [veja Eq. (1.2.9)], portanto acima deles deve haver uma torre de estados descendentes, conforme previsto pela Eq. (1.2.2). Estes estados descendentes são obtidos, por exemplo, deslocando-se a partícula mais próxima do ponto de Fermi. Note que a excitação partícula-buraco considerada na Figura 2.2.1(b), denominada R:p-h ou $i\partial\phi$ é uma excitação “filhote” com $j = 1$ e $j' = 0$, cujo operador primário é a identidade $\mathbb{1}$ ($Q = 0 = \beta$). Dizemos que esta excitação (R:p-h) consiste em fazer a partícula mais energética e com maior momento “saltar” um quanta de momento para a direita, na Figura 2.2.2(a) é mostrado uma excitação cuja partícula com maior (menor) momento realiza um “salto” para a direita (esquerda) de $\frac{2\pi}{L}j$ ($\frac{2\pi}{L}j'$) unidades de momento. Note que suas energia e momento são dadas por

$$E_{Q,\beta}^{j,j'} - E_0 = \frac{2\pi v_s}{L} \left(\frac{Q^2}{4} + \beta^2 + j + j' \right) \quad P_{Q,\beta}^{j,j'} - P_0 = \frac{2\pi}{L} (Q\beta + j - j'). \quad (2.2.12)$$

Existem ainda outros possíveis estados degenerados em energia, até ordem $o(L^{-1})$, e em momento. Na Figura 2.2.2(b) representamos apenas os mais altos níveis com $k > 0$, lado direito, de uma dispersão, para o caso $j = 3$, na qual se vê que existem três possíveis maneiras de “saltar” as partículas mais energéticas: (i) desloca-se a partícula do nível mais alto em três unidades de momento para a direita; (ii) desloca-se a partícula mais energética e segunda mais energética em duas e uma unidade(s) de momento, respectivamente; (iii) faz-se cada uma das

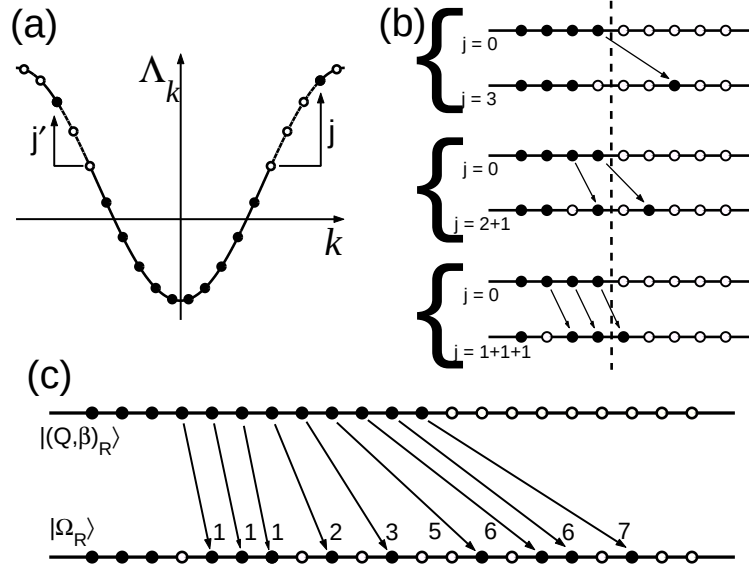


Figura 2.2.2: Círculos preenchidos (abertos) representam estados ocupados (desocupados). (a) Representação de uma excitação “filhote”, na qual “saltamos” com as partículas mais energéticas do lado direito (esquerdo) em $\frac{2\pi j}{L}$ ($\frac{2\pi j'}{L}$) unidades de momento. (b) Nas linhas superiores (inferiores) representamos apenas os níveis mais altos do lado direito, i.e., com momentos $k > 0$, da(s) distribuição(ões) fermiônicas com $j = 0$ ($j = 3$). Note que as três diferentes configurações fermiônicas “filhotes”, degeneradas em energia [até a ordem $o(L^{-1})$] e em momento, são obtidas “saltando” as partículas de maior momento como indicado pelas setas, e que, as $j = 3$ unidades de momento podem ser divididas das três maneiras apresentadas na legenda. (c) Novamente apresentamos apenas o lado direito de duas configuração fermiônicas, $|Q, \beta\rangle$ proveniente de uma excitação compacta, e um estado arbitrário $|\Omega\rangle$ com a mesma quantidade de partículas com momento $k > 0$. As setas representam a sequência de excitações partícula-buraco necessárias para construir o estado $|\Omega\rangle$ univocamente, os inteiros representam a amplitude do “salto” de cada partícula em unidades de $2\pi/L$. Verifique que as excitações agem em ordem decrescente de amplitude.

três partículas com maiores momentos “saltarem” uma unidade de momento para a direita. A fim de obtermos esta degenerescência, observe que $\frac{2\pi j}{L}$ quantas de momento podem ser divididas entre buracos e partículas. Assim a degenerescência $\deg^{j,j'}$ de um estado com energia $E_{Q,\beta}^{j,j'}$ e momento $P_{Q,\beta}^{j,j'}$ é $\deg^{j,j'} = p(j)p(j')$, sendo $p(j)$ o número de partições inteiras de um inteiro $j = n_1 + n_2 + \dots$ ($n_j \in \mathbb{N}$ e $n_1 \geq n_2 \geq \dots$), que pode ser obtido a partir da função geradora

$$\prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{1 - z^n} = 1 + z + 2z^2 + 3z^3 + 5z^4 + 7z^5 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} p(j)z^j. \quad (2.2.13)$$

De modo geral, um estado fermiônico arbitrário é caracterizado pelo conjunto de k 's ocupados $\{\Omega\}$, mas este conjunto é determinado pelo número de partícula em cada lado da relação de dispersão (direita/esquerda) e pela ocupação das partículas com maior energia. Então, a partir

de um estado $|Q, \beta\rangle$ compacto [veja Eq. 2.2.11], i.e, sem buracos no espaço de momento, podemos construir um estado geral $|\Omega\rangle$ apenas excitando as partículas do topo da relação de dispersão. Na Figura 2.2.2(c) ilustramos um procedimento reversível de ordenamento destas excitações, de modo que caracteriza $|\Omega\rangle$ de modo único [apresentamos apenas em um lado da relação de dispersão, o direito, por exemplo]. O procedimento é o seguinte: desloca-se a partícula do nível mais alto (do lado direito) no estado $|Q, \beta\rangle$ para o nível mais alto ocupado (do lado direito) de $|\Omega\rangle$, fazemos a mesma operação para o segundo nível mais alto de $|Q, \beta\rangle$, movendo esta partícula para o segundo nível mais alto de $|\Omega\rangle$, e assim por diante; por fim fazemos o mesmo procedimento para o lado esquerdo. Esta ordem de ocupações assegura que as excitações partícula-buraco, $\eta_{k+2n\pi/L}^\dagger \eta_k$, atuem em ordem decrescente da amplitude n dos “saltos”. Este procedimento permite encontrar qualquer conjunto de ocupação Ω e ainda este ordenamento das excitações partícula-buraco garante que nunca removeremos uma partícula de um estado não ocupado ou criaremos uma partícula em um estado já ocupado. Este procedimento é utilizado na técnica de bosonização, veja, por exemplo, a Ref. [89].

Em resumo, as dimensões de escala e o *spin* planar de uma dada excitação na cadeia XX são dados por

$$\Delta_{Q,\beta} = \frac{Q^2}{4} + \beta^2 \quad s_{Q,\beta} = Q\beta, \quad (2.2.14)$$

para operadores primários, que possuem a mesma estrutura do modelo gaussiano com raio de compactação $R = 2$, veja Eq. (1.2.9). Enquanto que para operadores não primários as dimensões de escala são $X_{Q,\beta}^{j,j'} = \Delta_{Q,\beta} + j + j'$ com degenerescência $\deg^{j,j'}$ [veja Eq. (2.2.13)]. Na próxima seção focar-nos-emos no ponto $h = 1$.

2.2.2 Campo magnético crítico $h_c = 1$

O campo magnético crítico, conforme discutido no início deste capítulo, é $h = h_c = 1$.

Estado fundamental

Pela Eq. (2.1.9) o estado fundamental para L par é o vácuo $|\text{GS}\rangle = |\text{vácuo}\rangle$, i.e., o conjunto de ocupação é vazio $\Omega_{\text{GS}} = \{\emptyset\}$. Portanto devemos ter $\eta_k |\text{GS}\rangle = 0 \forall k$, com momento total nulo [veja Eq. (2.1.10)] e energia

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_{k=-\pi(1-1/L)}^{\pi(1-1/L)} \Lambda_k, \quad k = \frac{2n+1}{L}\pi \quad (2.2.15)$$

Devido à forma da dispersão Λ_k não conseguimos calcular a soma acima de forma exata para L finito, entretanto estamos interessados apenas no comportamento assintótico de E_0 . Utilizaremos, então, a Fórmula de Euler-Maclaurin para inferirmos este comportamento.

Fórmula de Euler-Maclaurin [90]: Para uma função $F(t)$ com suas primeiras $2n$ derivadas contínuas no intervalo (a, b) temos:

$$\sum_{k=0}^{\frac{b-a}{h}} F(a + kh) \sim \frac{1}{h} \int_a^b dt F(t) + \frac{1}{2} [F(b) + F(a)] + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{h^{2k-1}}{(2k)!} B_{2k} \left. \frac{d^{2k-1}}{dt^{2k-1}} F(t) \right|_a^b, \quad (2.2.16)$$

sendo B_k os números de Bernoulli, e.g., $B_2 = 1/6$.

Portanto a energia do estado fundamental, Eq. (2.2.15), até a ordem $1/L$, é⁴

$$E_0 \sim -L \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} \Lambda_k + \frac{\pi}{12L} \left. \frac{d\Lambda_k}{dk} \right|_0^\pi + o(L^{-2}) = \left[e_\infty - \frac{\pi\gamma}{12L^2} + o(L^{-3}) \right] L, \quad (2.2.17)$$

sendo $e_\infty = \int_0^\pi \frac{dk}{2\pi} \sqrt{(1 - \cos k)^2 + \gamma^2 \sin^2 k}$. Comparando com a Eq. (1.2.1) vemos que $cv_s = \gamma/2$.

Estados excitados

O primeiro estado excitado corresponde a uma distribuição fermiônica com uma partícula no menor nível de energia $\Lambda_0 = 0$, i.e., $\Omega = \{0\}$. Cujas energia é [Eq. (2.1.10)]

$$E(\mathcal{N} = 1) = \frac{1}{2} \Lambda_0 - \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0, k = -\pi}^{\pi(1-2/L)} \Lambda_k, \quad k = \frac{2n\pi}{L},$$

usando a fórmula de Euler-Maclaurin [Eq. (2.2.16)] obtemos

$$\frac{E(\mathcal{N} = 1)}{L} \sim e_\infty + \frac{\pi\gamma}{8L^2} + o(L^{-3}),$$

de modo que o excesso de energia em relação ao estado fundamental é

$$\Delta E(\mathcal{N} = 1) = E(\mathcal{N} = 1) - E_0 = \frac{2\pi\gamma}{L} \frac{1}{8}, \quad (2.2.18)$$

com momento $P(\mathcal{N} = 1) = 0$.

Promovendo esta partícula para o próximo nível de energia permitido, com momento $\pm 2\pi/L$ sua energia será $E(\mathcal{N} = 1) + \frac{2\pi\gamma}{L} = E(\mathcal{N} = 1) + |P|\gamma =: E(\mathcal{N} = 1) + |P|v_s$. De modo que identificamos $v_s = \gamma$, e portanto $c = 1/2$.

Assim como foi feito no ponto XX podemos calcular a energia e o momento de um estado arbitrário adicionando $\mathcal{N}/2 + \text{mod}(\mathcal{N}, 2)/2 + \alpha$ partículas no ramo direito e $\mathcal{N}/2 - \text{mod}(\mathcal{N}, 2)/2 - \alpha$ no ramo esquerdo, e por fim, fazendo as partículas mais energéticas darem “saltos” de amplitudes totais $\frac{2\pi I}{L}$ e $\frac{2\pi I'}{L}$. O resultado é

$$\begin{aligned} E(\mathcal{N}, \alpha, I, I') - E_0 &= \frac{2\pi}{L} \gamma \left(\frac{\mathcal{N}^2}{4} + \alpha^2 - \frac{\text{mod}(\mathcal{N}, 2)}{8} + I + I' \right), \\ P(\mathcal{N}, \alpha, I, I') &= \frac{2\pi}{L} (\mathcal{N}\alpha + I - I'). \end{aligned} \quad (2.2.19)$$

⁴Note que $d\Lambda_k/dk$ é descontínua em $k = 0$, e apenas em $k = 0$.

(E L/2πγ, P L/2π)			[I ,degenerescência]					
(0+10,10)	<u>[8,5]</u>	<u>[2,2]</u>				(1+9,9)	<u>[9,1]</u>	<u>[5,5]</u>
(0+9,9)	<u>[7,4]</u>	<u>[1,1]</u>	(1/8+9,9)	<u>[9,1]</u>	<u>[6,7]</u>	(1+8,8)	<u>[8,1]</u>	<u>[4,4]</u>
(0+8,8)	<u>[6,4]</u>	<u>[0,1]</u>	(1/8+8,8)	<u>[8,1]</u>	<u>[5,5]</u>	(1+7,7)	<u>[7,1]</u>	<u>[3,3]</u>
(0+7,7)	<u>[5,3]</u>		(1/8+7,7)	<u>[7,1]</u>	<u>[4,4]</u>	(1+6,6)	<u>[6,1]</u>	<u>[2,2]</u>
(0+6,6)	<u>[4,3]</u>		(1/8+6,6)	<u>[6,1]</u>	<u>[3,3]</u>	(1+5,5)	<u>[5,1]</u>	<u>[1,1]</u>
(0+5,5)	<u>[3,2]</u>		(1/8+5,5)	<u>[5,1]</u>	<u>[2,2]</u>	(1+4,4)	<u>[4,1]</u>	<u>[0,1]</u>
(0+4,4)	<u>[2,2]</u>		(1/8+4,4)	<u>[4,1]</u>	<u>[1,1]</u>	(1+3,3)	<u>[3,1]</u>	
(0+3,3)	<u>[1,1]</u>		(1/8+3,3)	<u>[3,1]</u>	<u>[0,1]</u>	(1+2,2)	<u>[2,1]</u>	
(0+2,2)	<u>[0,1]</u>		(1/8+2,2)	<u>[2,1]</u>		(1+1,1)	<u>[1,1]</u>	
			(1/8+1,1)	<u>[1,1]</u>		(1+0,0)	<u>[0,1]</u>	
(0+0,0)	<u>[1,1]</u>		(1/8+0,0)	<u>[0,1]</u>				
N=0 α=0	N=2 α=1	N=4 α=2		N=1 α=0	N=3 α=1		N=2 α=0	N=4 α=1

Figura 2.2.3: Espectro de energia (2.2.19) para a cadeia XY no ponto $h = 1, \gamma > 0$, os traços representam os níveis de energia permitidos. Em preto temos os níveis dos setores $\mathcal{N} = 2\alpha$, $\mathcal{N} = 0, 2, 4$, correspondente à torre do operador identidade, $\Delta_1 = 0$. Em vermelho apresentamos os níveis para $\mathcal{N} = 2\alpha + 1$, $\mathcal{N} = 1, 3$, equivalentes à torre do operador magnetização, $\Delta_\sigma = 1/8$. Finalmente, a torre do operador energia, $\Delta_\epsilon = 1$, é representada pelos níveis em azul com $\mathcal{N} = 2(\alpha + 1)$, $\mathcal{N} = 2, 4$. Conforme vemos nos dados em parênteses, podemos escrever $\Delta E(\mathcal{N}, \alpha, I, I') = \frac{2\pi v_s}{L} (\Delta + j + j')$ e $P(\mathcal{N}, \alpha, I, I') = \frac{2\pi}{L} (j - j')$ com a degenerescência de j igual à soma das degenerescências dos níveis a uma mesma altura ($j' = 0$). Por exemplo, os níveis mais altos apresentados nas colunas em azul, ($\mathcal{N} = 2, \alpha = 0, I = 9$) e ($\mathcal{N} = 4, \alpha = 1, I = 5$) tem um e cinco estados degenerados com energia $\Delta E = \frac{2\pi v_s}{L} (1 + 9) = \frac{2\pi v_s}{L} (\Delta_\epsilon + 9)$ e momento $P = \frac{2\pi}{L} 9$, resultando em uma degenerescência seis como mostra a Tabela 1.2 para $\Delta = 1, j = 9$. Os outros conjuntos não apresentados de $(\mathcal{N}, \alpha)$, como por exemplo $(4, -2)$, contribuem para as degenerescências de j' .

Note a ingênua relação destas equações com as encontradas no caso do modelo XX [Eq. (2.2.12)]. Primeiramente note que para $\mathcal{N}$ ímpar $E(\mathcal{N}, \alpha, I, I') - E_0 \propto \left(\frac{\mathcal{N}^2 - 1}{4} + \alpha^2 + \frac{1}{8} \right) \in \mathbb{N} + \frac{1}{8}$, o que não ocorre para o modelo XX. Outra diferença é que devemos ter $\mathcal{N} \geq 0$ e $\alpha \in [-(\mathcal{N}/2 - \text{mod}(\mathcal{N}, 2)/2), \mathcal{N}/2 - \text{mod}(\mathcal{N}, 2)/2]$, enquanto que, no caso do XX, tínhamos, no limite termodinâmico, $Q, \beta \in (-\infty, \infty)$. Finalmente a degenerescência de I e I' também não pode ser dada pela Eq. (2.2.13), uma vez que temos um número limitado de partículas em cada lado da dispersão. Por conseguinte, o conjunto de operadores primários aqui deve ser diferente. Isto é esperado, pois, como citado no Capítulo 1, uma teoria com $c < 1$ possui um número finito de operadores primários que descrevem todo o espectro. Veja a Eq. (1.2.7), na qual, convenientemente, apresentamos os pesos conformes dos *três* operadores primários previstos

para uma teoria com $c = 1/2$. A seguir, mostramos a interpretação de cada operador primário.

O campo $(0, 0)$ que está presente em toda teoria é identificado como o operador identidade, $\Delta_1 = 0$. A identificação dos outros dois campos restantes pode ser feita através do modelo de Ising clássico bidimensional, calculando as correlações $\langle \sigma_i \sigma_{i+n} \rangle$ e $\langle \epsilon_i \epsilon_{i+n} \rangle$ que correspondem ao *spin* $\sigma = \pm 1$ e a densidade de energia ($\epsilon_i = \sigma_i \sigma_{i+1}$).⁵ Estes campos são então identificados como: energia $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ com dimensão de escala $\Delta_\epsilon = 1$; e magnetização $(\frac{1}{16}, \frac{1}{16})$ com dimensão $\Delta_\sigma = 1/8$. Logo o espectro (2.2.17) e (2.2.19) deve ser equivalente a

$$\begin{aligned} \frac{E_0}{L} &= e_\infty - \frac{cv_s}{6L^2} \text{ com } c = 1/2 \text{ e } v_s = \gamma \\ \Delta E_{\Delta_\phi}^{j,j'} &= \frac{2\pi v_s}{L} (\Delta_\phi + j + j') \text{ com } \Delta_1 = 0, \Delta_\sigma = \frac{1}{8} \text{ e } \Delta_\epsilon = 1 \\ P_{s_\phi}^{j,j'} &= \frac{2\pi}{L} (s_\phi + j - j') \text{ com } s_\phi = 0, \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

cujas degenerescências são dadas pela Tabela 1.2.

Na Figura 2.2.3 mostramos o espectro (2.2.19) para alguns valores de $\mathcal{N}$, α e I , fixando $I' = 0$. Ao lado de cada nível, entre parênteses, temos o excesso de energia em relação ao estado fundamental $\Delta E(\mathcal{N}, \alpha, I, I')$ em unidades de $\frac{2\pi v_s}{L}$ e o setor de momento $P(\mathcal{N}, \alpha, I, I')$ em unidades de $\frac{2\pi}{L}$. Acima de cada nível, entre colchetes, temos o valor de I , bem como a sua degenerescência. Como afirmamos anteriormente, esta degenerescência não pode ser dada pela Eq. (2.2.13).

Visto que: (i) podemos escrever as energias como $\Delta_\phi + j + j'$ e os momentos como $s_\phi + j - j'$, em unidades de $\frac{2\pi v_s}{L}$ e $\frac{2\pi}{L}$, respectivamente (ver Figura 2.2.3); e (ii) que somando as degenerescências dos níveis à mesma altura das colunas de mesma cor (mesmos Δ_ϕ 's) recuperamos a Tabela 1.2, podemos concluir que as Eqs. (2.2.19) e (2.2.20) são completamente equivalentes.

⁵Veja, por exemplo, a Ref. [38] para uma detalhada solução do modelo de Ising em dimensão $(1+1)$.

Capítulo 3

Emaranhamento no modelo XY

Através da solução exata do modelo XY podemos agora calcular a entropia de Rényi [Eq. (1.3.8)] de ℓ *spins* adjacentes. Como discutido no Apêndice A.II, devemos calcular a correlação $G_{m,n} = \langle (c_n^\dagger - c_n) (c_m + c_m^\dagger) \rangle$ [Eq. (A.II.6)] para $m, n = 1, 2, \dots, \ell$, que para o estado fundamental (vácuo) do modelo XY é dada por

$$G_{m,n} = \sum_{\text{todo } k} \frac{e^{ik(n-m)}}{L} \frac{\cos k - h + i\gamma \sin k}{|\cos k - h + i\gamma \sin k|}, \quad (3.0.1)$$

e os autovalores de ρ_ℓ são obtidos dos autovalores de $G^\dagger G$ e são relacionados com a entropia de Rényi conforme a Eq. (A.II.7).

Conforme já mencionado, para sistemas não críticos *unidimensionais*, entropia de Rényi deve atingir uma saturação à medida que o bloco de ℓ *spins* aumenta (Lei Entrópica da Área). Enquanto que para sistemas críticos e invariantes conformes a entropia de Rényi do estado fundamental comporta-se como $S_n(L, \ell) = S_n^{\text{CFT}}(L, \ell) + S_n^{\text{OSC}}(L, \ell)$, sendo $S_n^{\text{CFT}}(L, \ell)$ e $S_n^{\text{OSC}}(L, \ell)$ dados por (1.4.4) e (1.4.5), respectivamente. A fim de analisarmos o segundo termo é útil definirmos

$$D_n(L, \ell) = S_n(L, \ell) - \frac{c}{6} \left(1 + \frac{1}{n} \right) \log \left[\frac{L}{\pi} \sin \left(\frac{\pi}{L} \ell \right) \right], \quad (3.0.2)$$

que é esperado se comportar como

$$D_n(L, \ell) = c'_n + \frac{a_1 \delta_{n,1} + g_n (1 - \delta_{n,1}) \cos(\kappa \ell + \theta)}{|L \sin \left(\frac{\pi}{L} \ell \right)|^{p_n}}. \quad (3.0.3)$$

Iremos discutir o comportamento da entropia de Rényi para diversas regiões do diagrama de fases (crítica e não crítica) do modelo XY [Figura 2.1.1(c)] nas seções seguintes. Na próxima seção, analisaremos a entropia $S_n(L, \ell)$ do estado fundamental para casos com anisotropia $\gamma \neq 0$. Na segunda seção, centrar-nos-emos no modelo XX ($\gamma = 0$), na qual mostraremos diversos resultados de $S_n(L, \ell)$ tanto para o estado fundamental, quanto para estados excitados.

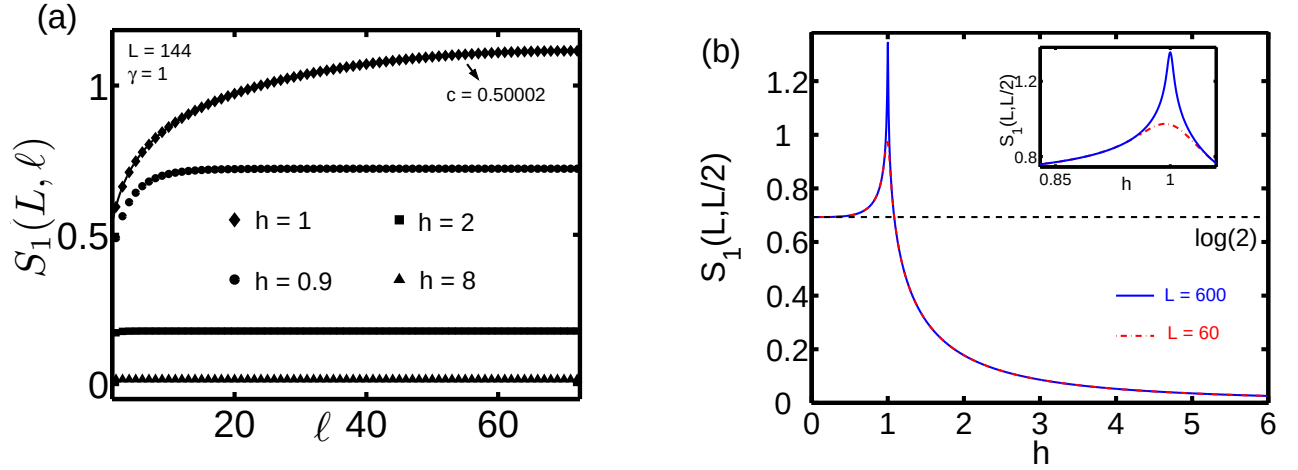


Figura 3.1.1: (a) Entropia de emaranhamento $S_1(L, \ell)$ vs ℓ para cadeias de tamanho $L = 144$ no ponto Ising ($\gamma = 1$) e alguns valores de h . Note que a entropia não satura apenas para $h = 1 = h_c$. (b) Entropia de emaranhamento entre as duas metades $S_1(L, \ell = L/2)$ de uma cadeia Ising como uma função do campo h para dois valores de L , ver legenda. A linha tracejada em preto é o limite $h \rightarrow 0$, i.e., $\log(2)$. (Inserção) Ampliação da figura principal.

3.1 Modelo de Ising ($\gamma = 1$) e campo crítico $h_c = 1$

Nesta seção vamos determinar numericamente a matriz G , cujos elementos são dados pela Eq. (3.0.1), assim como os autovalores de $G^\dagger G$. Como já mencionado, estes autovalores são utilizados para calcular a entropia de Rényi [veja Eq. (A.II.7)]. Vamos, primeiramente, analisar o modelo no ponto Ising, $\gamma = 1$. Como sabemos o modelo é crítico apenas para $h = 1 = h_c$. O comportamento da entropia de von Neumann para uma cadeia de comprimento $L = 144$ e alguns valores de h pode ser visto na Figura 3.1.1(a). O máximo valor de entropia é alcançado no ponto crítico $h_c = 1$, no qual a entropia se comporta segundo a lei de escala universal [Eq. (1.4.2)]. Ajustando nossos dados com a Eq. (1.4.2) encontramos $c = 0.50002$, em perfeito acordo com o valor exato da carga central ($c = 1/2$) calculado no Capítulo 2. É importante salientar que a lei universal (1.4.2) é válida no regime de escala $L \gg \ell \gg 1$, portanto os primeiros pontos ($\ell/L \ll 1$) não são considerados no ajuste. Note que outros valores de campo magnético ($h \neq 1$) levam a uma saturação da entropia, resultado esperado para sistemas não críticos, em acordo com a chamada Lei Entrópica da Área.

A fim de entender este valor de saturação, mostramos na Figura 3.1.1(b) a entropia de emaranhamento em função de h para cadeias de Ising de tamanhos $L = 600$ e $L = 60$ divididas ao meio. Observe que S_1 atinge seu valor máximo quando $h \rightarrow 1$, e ainda, este pico aumenta com o tamanho do sistema, o que é esperado, uma vez que, no ponto crítico a Lei Entrópica da Área é violada. Entretanto, temos dois comportamentos distintos para a saturação da entropia

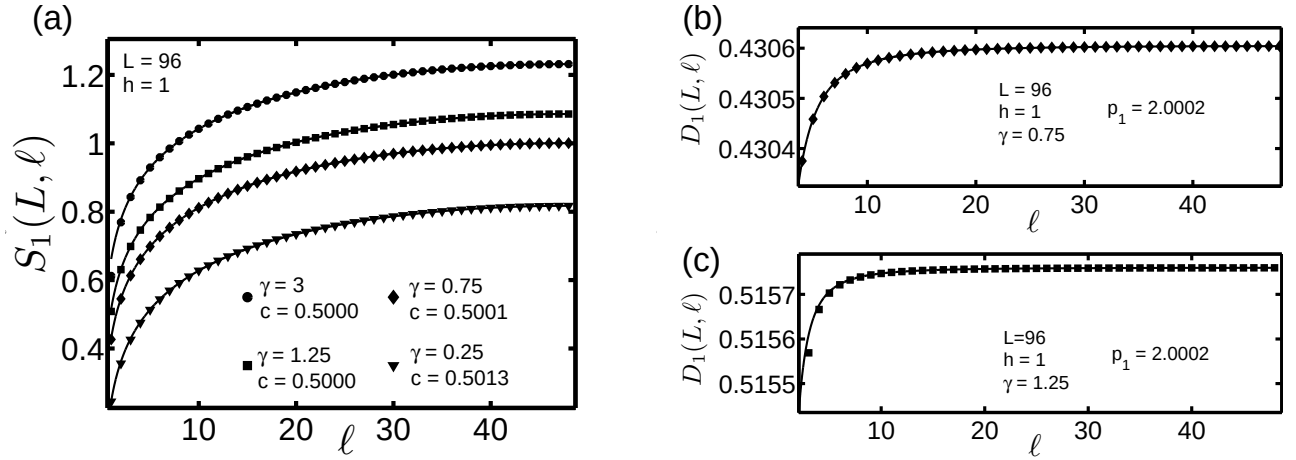


Figura 3.1.2: (a) Entropia de emaranhamento da cadeia XY com $L = 96$ sítios no ponto crítico $h = h_c = 1$ e diferentes parâmetros de anisotropia γ . A entropia comporta-se logaritmicamente, i.e., a Lei da Área é sempre violada, ajustando nossos dados com a Eq. (1.4.2) confirmamos que o sistema, nesses pontos, tem a mesma classe de universalidade do modelo de Ising ($c = 1/2$). (b) e (c) Resultados da diferença D_1 para alguns parâmetros apresentados na figura (a).

quando $h \rightarrow 0$ e quando $h \rightarrow \infty$.

(i) S_1 vai para $\log(2)$ quando $h \rightarrow 0$: note que a hamiltoniana fica $\hat{H}_{XY} \rightarrow -2 \sum_n s_n^x s_n^x$, e o estado fundamental é ferromagnético puro, porém temos duas possíveis configurações com sinais opostos da magnetização. Desta forma o estado é uma superposição destes dois estados produtos e então $S_1 \neq 0$, em particular se as duas configurações da decomposição de Schmidt [Eq. (1.3.2)] são equiprováveis devemos ter $S_1 = \log(2)$, como mostra a Figura 3.1.1(b). Formalmente todos ϵ_q 's divergem exceto um, ϵ_0 que é nulo;

(ii) quando $h \rightarrow \infty$, S_1 tende a zero: neste caso temos $\hat{H}_{XY} \rightarrow -hs^z$, portanto o estado fundamental é um estado puro com todos os *spins* alinhados com o campo magnético. Como só temos uma configuração possível na decomposição de Schmidt [Eq. (1.3.2)], S_1 deve se anular. Formalmente temos $\nu_q = 1 \forall q$, ou ainda a relação de dispersão da “hamiltoniana de emaranhamento” ϵ_q [lembrando que $\nu_q = \tanh(\epsilon_q/2)$ e também veja as Eqs. (1.3.6), (A.II.2) e (A.II.4)] diverge para todo q .

Agora vamos considerar apenas o caso $h = 1 = h_c$ para diversos valores de anisotropia γ . Na Figura 3.1.2(a) apresentamos $S_1(L, \ell)$ para uma cadeia de tamanho $L = 96$. Veja que a Lei da Área é sempre violada para $h = 1$, uma vez que $S_1(L, \ell)$ cresce monotonicamente com o tamanho do subsistema de ℓ . Ajustando então nossos dados com a Eq. (1.4.2) encontramos $c = 0.5013, 0.5001, 0.5000$ e 0.5000 para $\gamma = 0.25, 0.75, 1.25$ e 3 , respectivamente. Confirmando que a classe de universalidade de comportamento crítico é a mesma do modelo de Ising ($c = 1/2$).

Vamos agora analisar a diferença $D_1(L, \ell)$. Tais diferenças são mostradas nas Figuras 3.1.2(b) e (c) para dois valores de γ . Utilizando a Eq. (3.0.3) para ajustar nossos dados encontramos os seguintes expoentes: $p_1 = 2.0002$ e 2.0003 para $\gamma = 0.75$ e 1.25 , respectivamente. Como já dito no Capítulo 1, este expoente é esperado ser universalmente igual a dois ($p_1 = 2$) para todos os modelos. Deste modo, nossos resultados, no regime de escala, estão de fato em pleno acordo com tal conjectura [74].

Analiseemos agora a entropia de Rényi para $n > 1$. Na Figura 3.1.3(a) mostramos $S_2(L, \ell)$ para alguns valores de anisotropia e campo igual ao campo crítico, $h = 1 = h_c$. Nossos dados estão novamente em acordo com a classe de universalidade de comportamento crítico esperada ($c = 1/2$, que foi calculada de modo exato na Seção 2.2.2). Na Figura 3.1.3(b) e (c) temos a diferença $D_2(L, \ell)$ [Eq. (3.0.2)], que não apresenta nenhuma oscilação. Usando a Eq. (3.0.3), com $\kappa = 0 = \theta$, para ajustar nossos resultados obtemos $p_2 = 1.06$ e 0.99 para $\gamma = 0.5$ e 2 , respectivamente. Semelhantemente, nas Figuras 3.1.3(d) e (e) apresentamos a entropia de Rényi para $n = 3$ e $n = 4$, bem como as diferenças $D_3(L, \ell)$ e $D_4(L, \ell)$, respectivamente. Ajustando estes dados encontramos sempre $c \sim 1/2$, $p_3 \sim 2/3$ e $p_4 \sim 1/2$ conforme disposto nas legendas. De modo que, em geral, temos $c = 1/2$ e $p_n = 2/n$. Estes resultados estão em acordo com as conjecturas mencionadas na Seção 1.4 [72, 74, 77, 78]. Conforme comentado na Seção 2.2.2 a dimensão do operador energia é $\Delta_\epsilon = 1$, de modo que $p_1 = 2$ e $p_n = 2\Delta_\epsilon/n$ para $n > 1$.

Outro importante ponto a ser salientado é que a entropia de Rényi $S_n(L, \ell)$ do modelo XY no ponto $h = h_c$ com condições periódicas de contorno não apresenta nenhuma oscilação para qualquer n . Este é também um resultado esperado para modelos que possuam apenas simetrias discretas [74], e.g., simetria de translação.

3.2 Modelo XX ($\gamma = 0$)

Para o caso do ponto XX a Eq. (3.0.1) é extraordinariamente simplificada, uma vez que as funções de correlação “anômalas” são trivialmente nulas para qualquer estado, i.e., $\langle c_n^\dagger c_m^\dagger \rangle = 0 = \langle c_n c_m \rangle \forall m, n$.

Logo $G_{m,n} = \langle c_m^\dagger c_n \rangle - \langle c_m c_n^\dagger \rangle$, e ainda $G^\dagger = G$ de modo que a Eq. (A.II.6) fica $\Theta_q G = \tanh(\epsilon_q/2) \Theta_q$. É então útil definirmos outra correlação $\mathcal{C}_{m,n} = \langle c_m^\dagger c_n \rangle$, que é dada por $\mathcal{C}_{m,n} = \sum_q \omega_q \theta_q^*(m) \theta_q(n)$, sendo $\omega_q = \frac{1 + \tanh(\epsilon_q/2)}{2} = \frac{1 + \nu_q}{2}$. Logo, para encontrarmos os autovalores da matriz de densidade reduzida é suficiente calcular os autovalores ω_q da matriz de correlação $\mathcal{C}$. Neste caso a Eq. (A.II.7) para a entropia de Rényi é dada por

$$S_n(L, \ell) = \frac{1}{1-n} \sum_{i=1}^{\ell} \log [\omega_{q_i}^n + (1 - \omega_{q_i})^n]. \quad (3.2.1)$$

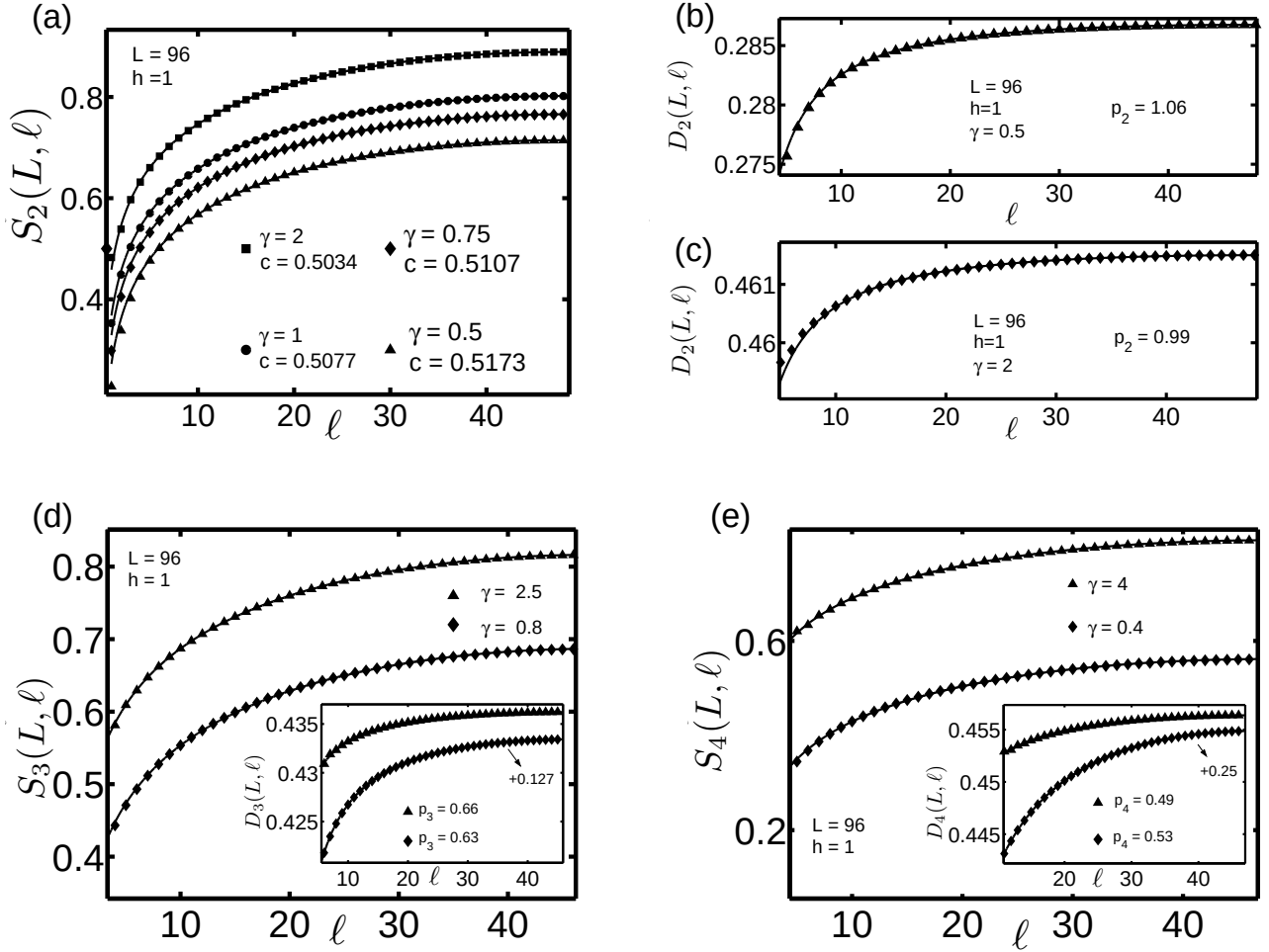


Figura 3.1.3: (a) Entropia de Rényi com $n = 2$ no ponto crítico $h = h_c = 1$ e diferentes parâmetros de anisotropia γ de uma cadeia XY com $L = 96$ sítios. (b) e (c) Resultados da diferença D_2 para alguns dos mesmos parâmetros da figura (a). (d) e (e) Mesmo da figura (a) para $n = 3$ e $n = 4$, respectivamente. As setas indicam valores que foram adicionados em D_n para apresentar os dados no mesmo gráfico. (Inserções) Diferenças D_3 e D_4 para as mesmas anisotropias.

Para um dado estado $|\Omega\rangle$ arbitrário [veja Eq. (2.2.4)] temos

$$\mathcal{C}_{m,n}^{|\Omega\rangle} = \sum_{\{k\}} \frac{e^{-ik(m-n)}}{L} \langle \Omega | \eta_k^\dagger \eta_k | \Omega \rangle = \frac{1}{L} \sum_{k \in \Omega} e^{-ik(m-n)}. \quad (3.2.2)$$

Nas próximas duas subseções, determinaremos numericamente os autovalores da matriz de correlação $\mathcal{C}^{|\Omega\rangle}$ a fim de obter a entropia de Rényi para o estado fundamental, bem como para diversos estados excitados.

3.2.1 Estado fundamental

Para o estado fundamental, com número de partículas $\mathcal{N}_F = \rho_F L$ par, a correlação é dada por:

$$\mathcal{C}_{m,n}^{|\text{GS}\rangle} = \frac{\sin[(m-n)\pi\rho_F]}{L \sin[(m-n)\pi/L]},$$

que no regime de escala, $L \gg |m-n|$, se comporta assintoticamente como $\mathcal{C}_{m,n}^{|\text{GS}\rangle} \sim \frac{\sin[(m-n)\pi\rho_F]}{\pi(m-n)}$.

Na Figura 3.2.1(a) mostramos a entropia de von Neumann de uma cadeia com $L = 1000$ sítios e diversos valores de campo magnético, $k_F = \rho_F/\pi = 1 - \arccos(h)/\pi$ [veja Eq. (2.2.10)]. Os valores da carga central obtidos ajustando nossos dados com a Eq. (1.4.2) são apontados na Tabela 3.1. Note que estes valores concordam plenamente com o valor exato da carga central obtido no capítulo anterior, $c = 1$.

Vale mencionar que a constante c'_1 , como já dito, é não universal. Entretanto, para o modelo XX esta constante foi calculada analiticamente por Jin e Korepin [91], que encontraram

$$c'_1 = \int_0^\infty \frac{dt}{t} \left[\frac{t \cosh(t/2)}{2 \sinh^3(t/2)} - \frac{1}{\sinh^2(t/2)} - \frac{e^{-t}}{3} \right] + \frac{\log(2 \sin k_F)}{3} \simeq 0.4950179 + \frac{\log(2 \sin k_F)}{3}.$$

Agora vamos analisar as correções de tamanho finito, assim como fizemos na seção precedente. A fim de analisar o termo subdominante, apresentamos nas Figuras 3.2.1(b) e (c) a diferença $D_1(L, \ell)$ [Eq. (3.0.2)] para os mesmos valores de ρ_F usados na Figura 3.2.1(a). Como se pode observar, nenhuma oscilação aparece na entropia de emaranhamento, este comportamento foi visualizado em diversos modelos com um modo de *gap*-nulo, portanto parece ser

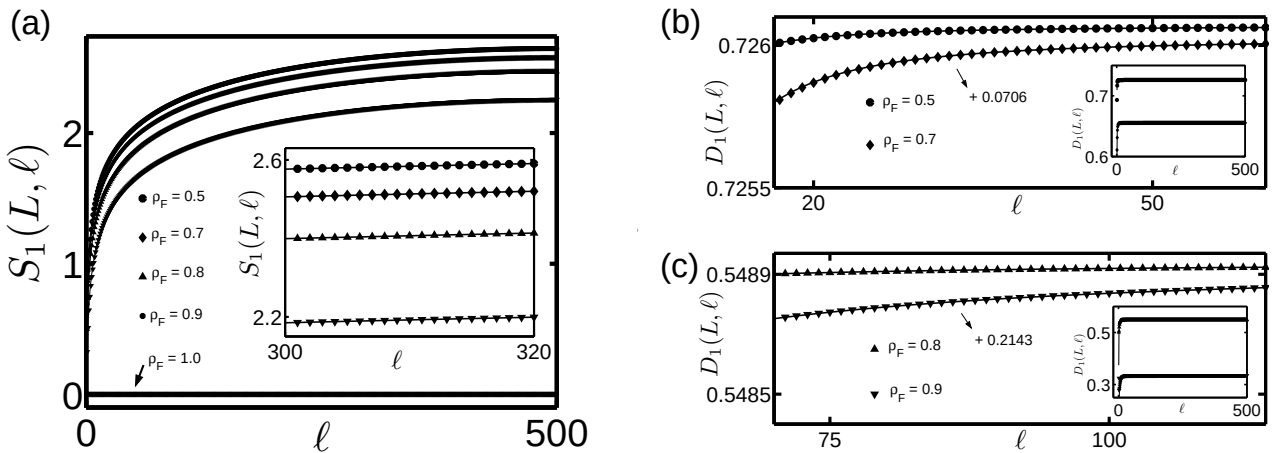


Figura 3.2.1: (a) $S_1(L, \ell)$ vs ℓ para o modelo XX, $\gamma = 0$, com diferentes campos externos e $L = 1000$ spins. (b) A diferença D_1 , termo subdominante da entropia de emaranhamento, caracterizado pelo comportamento universal em lei de potência ℓ^{-2} . As setas indicam valores que foram adicionados à D_1 a fim de dispor os dados no mesmo gráfico.

ρ_F	c	p_1	a_1	c'_1
0.5	1.00000 (1)	1.9999999 (2)	-0.0166669 (-0.0166667)	0.7260675 (0.7260670)
0.7	1.00001 (1)	1.9999987 (2)	-0.0606600 (-0.060656)	0.6554228 (0.6554218)
0.8	1.00003 (1)	1.9999870 (2)	-0.1745530 (-0.1745356)	0.5489376 (0.5489358)
0.9	1.00015 (1)	1.9978303 (2)	-0.8067103 (-0.8060113)	0.3346209 (0.3346140)

Tabela 3.1: Carga central c do modelo XX e expoente universal p_1 estimados via ajustes das Eqs. (1.4.2) e (3.0.3), respectivamente. Mostramos também as constantes não universais a_1 e c'_1 . Os valores entre parênteses são os resultados exatos.

universal (isto não é mais verdade na presença de diferentes condições de contorno). Para o modelo XX esta correção também foi calculada de modo analítico, por Calabrese e Essler, que encontraram o seguinte resultado [73]

$$S_1 \simeq S_1^{\text{CFT}} - \frac{1}{12} \left(\frac{1}{5} + \cot^2 \pi \rho_F \right) \left| \frac{L}{\pi} \sin \left(\frac{\pi}{L} \ell \right) \right|^{-2},$$

de modo que devemos ter $a_1 = -\frac{1}{12} \left(\frac{1}{5} + \cot^2 \pi \rho_F \right)$ e $p_1 = 2$ na Eq. (3.0.3). Ressaltando que o comportamento em lei de potência, ℓ^{-2} , também já foi verificado em vários modelos distintos, indicando que o expoente $p_1 = 2$ deve ser independente do modelo, i.e., universal.

O expoente p_1 , bem como c'_n e g_1 encontrados ajustando nossos resultados com a Eq. (3.0.3) são apresentados na Tabela 3.1. Os valores de baixo, entre parênteses, são os valores exatos em perfeito acordo com nossos ajustes [linhas contínuas na Figura 3.2.1(b)].

A seguir, centrar-nos-emos em casos com $n > 1$. Nossos resultados para tais índices estão dispostos na Figura 3.2.2, na qual são observadas fortes oscilações. Este padrão oscilatório é previsto no modelo XX, uma vez que este possui uma simetria contínua (rotação em torno do eixo- z no espaço dos *spins*). E ainda, as oscilações são bem entendidas neste modelo, a primeira correção subdominante [Eq. (3.0.3)] foi calculada analiticamente por Calabrese e colaboradores na Ref. [72]. Eles encontraram que esta é dada por

$$S_n \simeq S_n^{\text{CFT}} + Q_n |\sin k_F|^{-2/n} \cos(2k_F \ell) \left| \frac{L}{\pi} \sin \left(\frac{\pi}{L} \ell \right) \right|^{-2/n}, \quad (3.2.3)$$

com $Q_n = \frac{2^{1-2/n}}{1-n} \Gamma^2 \left(\frac{1+1/n}{2} \right) \Gamma^{-2} \left(\frac{1-1/n}{2} \right)$. Comparando então com a Eq. (3.0.3) devemos ter $g_n = Q_n |(\sin k_F)/\pi|^{-2/n}$, $p_n = 2/n$, $\kappa = 2k_F$ e $\theta = 0$. O valor numérico dos três primeiros termos da sequencia Q_n com $n = 2, 3$ e 4 são $Q_2 \simeq -0.114237$, $Q_3 \simeq -0.160954$ e $Q_4 \simeq -0.172643$.

Vamos agora comparar nossos resultados com estas expressões analíticas. Na Figura 3.2.2(a) temos a entropia de Rényi com $n = 2$ para dois valores de campo magnético (ou ρ_F), na qual se pode observar que o comportamento dominante é de fato a parte logarítmica, S_n^{CFT} , governada pela carga central $c = 1$. Nas duas inserções desta figura apresentamos a diferença $D_2(L, \ell)$ calculada conforme a Eq. (3.0.2), na inserção superior todos os sítios são mostrados, enquanto que na inferior exibimos apenas alguns, para uma melhor visualização do padrão oscilatório. Ajustando nossos dados com a Eq. (3.0.3) obtemos a constante g_2 e o expoente p_2 . Estes valores estão indicados na Tabela 3.2, na qual podemos encontrar também os resultados exatos, entre parênteses. Note novamente uma perfeita concordância entre nossos resultados numéricos e os

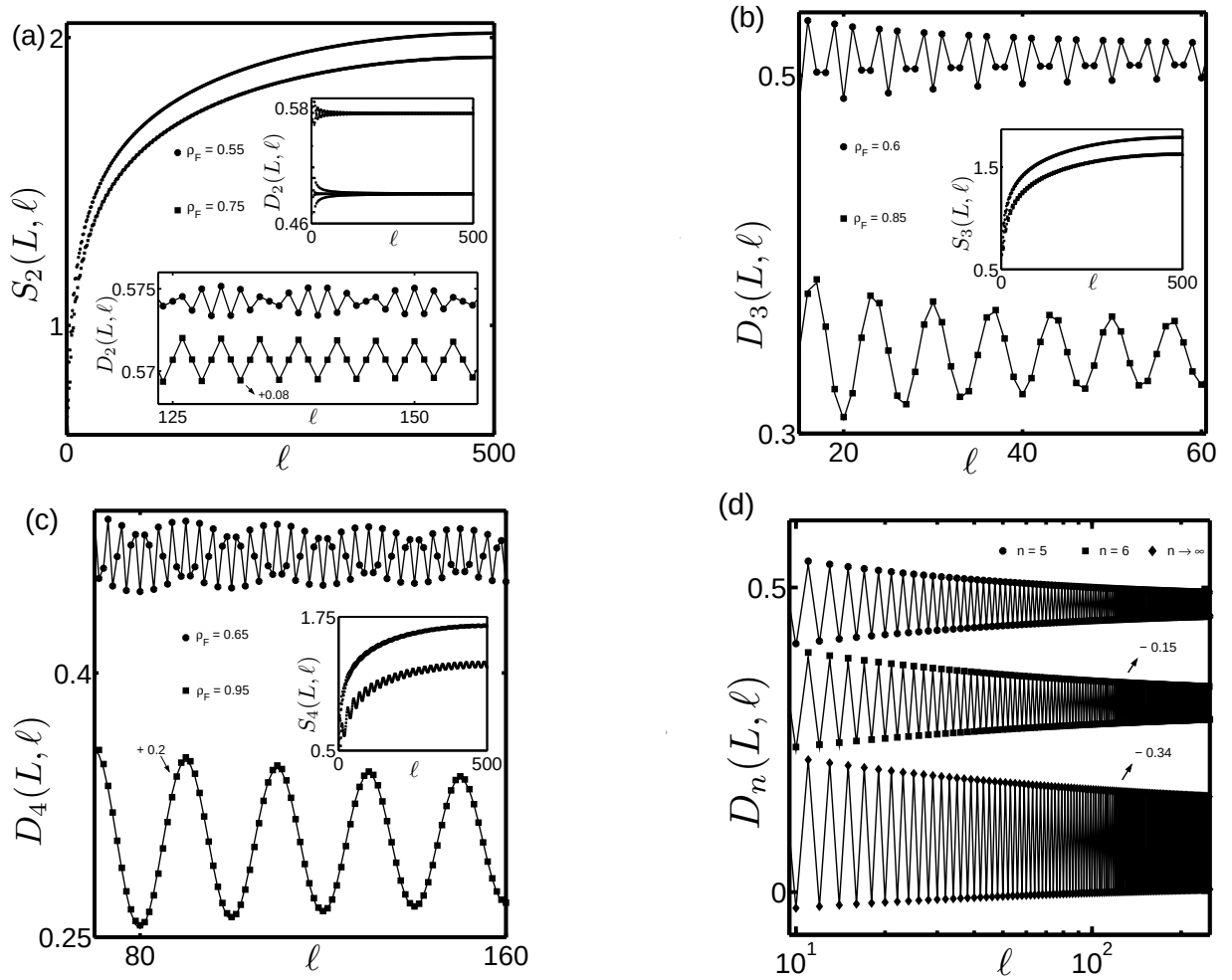


Figura 3.2.2: (a) Entropia de Rényi para $n = 2$ e $L = 1000$ e dois valores de ρ_F . (Inserção) Diferença D_2 para mesmos valores de L e ρ_F . (b) e (c) Diferença D_n , com $n = 3$ e 4 para $L = 1000$ e dois valores de ρ_F . (Inserções) S_n para mesmos valores de n , L e ρ_F . (d) Diferença D_n para $n = 5, 6$ e 1000 em uma cadeia com $L = 1000$ sítios e $\rho_F = 1/2$. Conforme previsto pela Eq. (3.2.3) existe um suave decaimento, da ordem de $\ell^{-2/n}$, na amplitude das oscilações.

ρ_F	p_n	g_n		ρ_F	p_n	g_n	
0.55	0.999996 (1)	-0.115655 (-0.115661)	$n = 2$	0.65	0.500937 (0.5)	-0.183834 (-0.182898)	$n = 4$
0.75	1.000012 (1)	-0.161552 (-0.161556)		0.95	0.498257 (0.5)	-0.432542 (-0.436499)	
0.60	0.666723 (2/3)	-0.166476 (-0.166429)	$n = 3$		0.401647 (0.4)	-0.172605 (-0.170795)	$n = 5$
0.85	0.666440 (2/3)	-0.272123 (-0.272481)		0.5	0.337897 (1/3)	-0.168929 (-0.163909)	$n = 6$

Tabela 3.2: Expoente p_n e a constante g_n , não universal, para o modelo XX estimados via ajuste dos nossos dados com a Eq. (3.0.3). Os valores em parênteses são os exatos (veja texto).

analíticos.

Nas Figuras 3.2.2(b) e (c) apresentamos as diferenças $D_3(L, \ell)$ e $D_4(L, \ell)$, respectivamente. Novamente a rede tem $L = 1000$ sítios, e consideramos outros valores de campo magnético, conforme indicamos nas legendas. Nas inserções destas figuras temos as entropias de Rényi para cada caso, note que as oscilações ficam mais fortes a medida que o índice n aumenta. Ajustando estes dados de $D_n(L, \ell)$ com a expressão universal (3.0.3) encontramos $p_n \sim 2/n$, conforme esperado. Os valores de g_n são também mostrados na tabela e estão em perfeito acordo com a previsão analítica.

Como salientado no parágrafo anterior, as oscilações aumentam quando o índice n da entropia de Rényi aumenta, mantendo o seu período de oscilação fixa. A fim de visualizar melhor este comportamento exibimos na Figura 3.2.2(d) os resultados da diferença $D_n(L, \ell)$ para valores maiores de n . Consideramos, neste caso, a cadeia XX com $L = 1000$ sítios e campo magnético nulo, $h = 0$, de modo que $k_F = \pi/2$ e as entropias oscilam então com um período espacial $2\pi/k_F = 4$. São apresentados resultados para $n = 5, 6$ e 1000, nos dois primeiros casos ($n = 5, 6$) ajustamos nossos dados como anteriormente, usando a Eq. (3.0.3). Os valores de $p_n \sim 2/n$ e g_n estão também dispostos na Tabela 3.2 e podem ser comparados com valores exatos [Eq. (3.2.3)] apresentados entre parênteses. Por fim, para o caso $n = 1000$, estamos bem próximos do limite $n \rightarrow \infty$. Neste limite o comportamento da entropia de Rényi foi também calculada analiticamente na Ref. [72], sendo a diferença D_∞ dada por

$$D_\infty \simeq \tilde{g}_\infty [1 - 3(-)^\ell] \frac{1}{\log [2b \frac{L}{\pi} \sin(\frac{\pi}{L} \ell)]},$$

sendo as constantes $\tilde{g}_\infty = \frac{\pi^2}{48} \simeq 0.205617$ e $b \simeq 7.12429$. Utilizando a expressão acima para ajustar nossos resultados de $D_{1000}(L, \ell)$ apresentados na Figura 3.2.2(d) obtemos as seguintes

constantes $\tilde{g}_\infty = 0.204586$ e $b = 7.13782$, que também estão em ótimo acordo com os valores exatos.

É importante acentuar que os valores de g_n e p_n , que obtivemos, foram encontrados ajustando a entropia de Rényi da matriz de densidade reduzida, para ℓ e L finitos [Eq. (3.2.1)], com as previsões das Eqs. (3.0.2) e (3.0.3). Apesar destes valores estarem em bom acordo com os valores exatos [veja Tabela 3.2], note que quando o índice n aumenta a acurácia dos nossos ajustes é reduzida. Isto ocorre porque a Eq. (3.2.3) é válida somente até a ordem ℓ^{-p_n} , e como $p_n \propto 1/n$ [72, 74] as Eqs. (3.0.2) e (3.0.3) são insuficientes para n grande (principalmente para pequenos valores de ℓ). Para o caso do modelo XX [$p_n = 2/n$, conforme Eq. (3.2.3)] correções subdominantes à Eq. (3.2.3) [resultado exato das Eqs. (3.0.2) e (3.0.3)] foram também calculadas analiticamente na Ref. [73], entretanto elas não são o objetivo deste trabalho, onde nos restringimos apenas à primeira correção subdominante.

Na próxima seção, passaremos ao estudo da entropia de Rényi de estados excitados, em particular, dos estados excitados de mais baixa energia.

3.2.2 Estados excitados

Diferentemente da entropia de Rényi do estado fundamental, para a qual existem diversos estudos que confirmam a veracidade do comportamento universal previsto pela CFT (sendo tanto a carga central c , bem como o expoente crítico p_n obtidos com ótima precisão para diversos sistemas), até o presente apenas alguns trabalhos consideraram estados excitados [25, 28–30, 82–87]. De modo que mais investigações nesta frente são altamente desejadas. A entropia de Rényi para estados excitados também possui um interessantíssimo comportamento universal, que depende das características no operador Υ associado ao estado excitado [28, 29], estas características estão resumidos nas Eqs. (1.4.6) - (1.4.9).

Fig. 2.2.1	representação compactada de Λ_k	$(h : p)$	(Q, β)	(j, j')	(Δ, s)	$(h, \bar{h})$
(a)	o o o o ● ● ● ● ... ● ● ● ● o o o o	$(:)$	$(0, 0)$	$(0, 0)$	$(0, 0)$	$(0, 0)$
(b)	o o o o ● ● ● ● ... ● ● ● ● ● o o o	$(1 : 1)$	$(0, 0)$	$(1, 0)$	$(0, 0)$	$(0, 0)$
(c)	o o ● ● ● ● ● ● ... ● ● ● ● ● ● o o	$(: \pm 1, \pm 2)$	$(4, 0)$	$(0, 0)$	$(4, 0)$	$(2, 2)$
(d)	o o o o o o ● ● ... ● ● ● ● o o o o	$(\pm 1, -2 :)$	$(3, 0)$	$(0, 0)$	$(\frac{9}{4}, 0)$	$(\frac{9}{8}, \frac{9}{8})$
(e)	o o o o o ● ● ● ... ● ● ● ● ● ● o o	$(-1 : 1, 2, 3)$	$(2, 2)$	$(0, 0)$	$(5, 4)$	$(\frac{9}{2}, \frac{1}{2})$
(f)	o o o ● ● ● ● ● ... ● ● ● ● o o o o	$(: -1)$	$(1, -1)$	$(0, 0)$	$(\frac{5}{4}, -1)$	$(\frac{1}{8}, \frac{9}{8})$

Tabela 3.3: Representação esquemática compactada das dispersões dos estados previamente apresentados na Figura 2.2.1, em termos da notação $(h : p)$. Como usual, os círculos preenchidos (abertos) representam estados ocupados (desocupados). As linhas verticais denotam as posições dos pontos de Fermi. Também mostramos os valores das quantidades Q , β , j e j' [veja Eq. (2.2.12)], da dimensão de escala do campo primário $\Delta_{Q,\beta}$ e do *spin* planar $s_{Q,\beta}$ [veja Eq. (2.2.14)].

A fim de analisarmos os diversos tipos de excitações, vamos introduzir a seguinte notação (veja Ref. [29]): Denotamos $(-h_1^L, -h_2^L, \dots, h_1^R, h_2^R, \dots : -p_1^L, -p_2^L, \dots, p_1^R, p_2^R, \dots)$ como uma excitação com buracos nos h_j^L 's (h_j^R 's) valores de momento permitidos abaixo do ponto de Fermi à esquerda (direita) e partículas nos p_i^L 's (p_i^R 's) valores de momento permitidos acima deste, ou seja o estado:

$$\left(\prod_{i,i'} \eta_{i'}^\dagger - \left\{ k_F + \frac{2\pi}{L} \left[p_i^L + \frac{\text{mod} \mathcal{N}}{2} \right] \right\} \eta_{i'}^\dagger \left\{ k_F + \frac{2\pi}{L} \left[p_{i'}^R - \frac{\text{mod} \mathcal{N}}{2} \right] \right\} \prod_{j,j'} \eta_{j'} - \left\{ k_F - \frac{2\pi}{L} \left[h_j^L - 1 - \frac{\text{mod} \mathcal{N}}{2} \right] \right\} \eta_{j'} \left\{ k_F - \frac{2\pi}{L} \left[h_{j'}^R - 1 + \frac{\text{mod} \mathcal{N}}{2} \right] \right\} \right) |\text{GS}\rangle. \quad (3.2.4)$$

Sendo $\eta_k^\dagger$ (η_k) o operador de criação (aniquilação) de uma partícula com momento k e energia Λ_k conforme Eq. (2.2.2), $\mathcal{N}$ é o número de partículas da excitação e $|\text{GS}\rangle$ é o estado fundamental dado por (2.2.5). Por simplicidade, nesta subseção iremos abordar apenas sistemas na ausência de campo magnético externo.

Na Tabela 3.3 ilustramos as excitações indicadas na Figura 2.2.1, em termos da notação $(h : p)$ e também apresentamos outro modo compacto de representarmos os diagramas de dispersão. Todas as excitações da Tabela 3.3, exceto a excitação (b), são compactas. Por

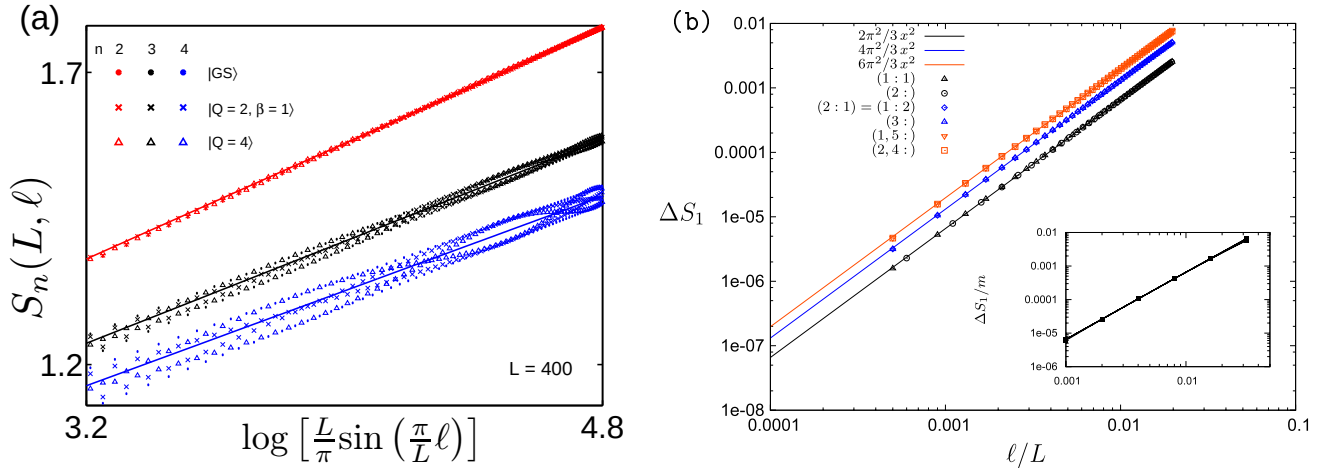


Figura 3.2.3: (a) Entropia de Rényi S_n para três estados do modelo de XX com campo nulo, $L = 400$ sítios e índices $n = 2, 3$ e 4 . As excitações compactas $|Q, \beta\rangle$ foram definidas no capítulo anterior [veja por exemplo a Eq. (2.2.12)]. As linhas contínuas são dadas pela universal Eq. (1.4.4), que é a contribuição dominante para a entropia de Rényi do estado fundamental e também de estados excitados compactos [veja Tabela 3.3]. (b) Comportamento do excesso na entropia de von Neumann ΔS_1 , no regime $\ell/L \ll 1$, para diferentes estados excitados. O tamanho do sistema é $L = 10000$. As linhas contínuas representam a Eq. (1.4.9), os valores de d^Υ são mostrados na legenda, e de acordo com a Tabela 3.4 estes não são as dimensões de escala do operador Υ associado com a excitação. (Inserção) $\Delta S_1/m$ para vários estados $(1 : m)$, com m de 1 até 14 para um sistema com $L = 8000$, que satisfaz a Eq. (1.4.9) com $d^\Upsilon = m$. A figura (b) foi retirada da Ref. [29].

exemplo, a excitação (c) é representada por $(: \pm 1, \pm 2)$ em termos da notação $(h : p)$, note que o estado desta excitação é $|Q = 4, \beta = 0\rangle = \eta_{-(k_F + \frac{4\pi}{L})}^\dagger \eta_{-(k_F + \frac{2\pi}{L})}^\dagger \eta_{(k_F + \frac{2\pi}{L})}^\dagger \eta_{(k_F + \frac{4\pi}{L})}^\dagger |\text{GS}\rangle$.

Vamos analisar primeiramente as entropias associadas com excitações compactas, que são esperadas serem a mesma do estado fundamental. Na Figura 3.2.3(a), mostramos as entropias de Rényi (para índices $n = 2, 3$ e 4) de uma cadeia com $L = 400$ sítios para o estado fundamental $|\text{GS}\rangle$, e para os estados excitados $|Q = 2, \beta = 1\rangle$ e $|Q = 4, \beta = 0\rangle$. Note que a única diferença entre as entropias do estado fundamental e dos estados excitados é o diferente comportamento das oscilações não usuais. As linhas contínuas representam a previsão universal dada pela Eq. (1.4.4), também obedecida por esta classe de estados excitados. Encontramos para um sistema de tamanho $L = 400$ que $\Delta S_n = S_n^{\text{exc}} - S_n^{\text{GS}} \lesssim 0.05$ para estas excitações, bem como para muitas outras não apresentadas aqui. Aumentando o sistema para $L = 1000$ obtemos que $\Delta S_n = S_n^{Q=4} - S_n^{\text{GS}} \lesssim 0.03$, evidenciando que estas oscilações devem desaparecer no limite termodinâmico, no qual esperamos que $S_n^{\text{exc}} = S_n^{\text{GS}}$, conforme provado pelos autores das Refs. [28, 29].

Consideremos agora as excitações não-compactas. A entropia de emaranhamento destes estados, com buracos no espaço de momentos, não obedece à Eq. (1.4.4). Como exemplo, temos a excitação partícula-buraco, $|\partial\phi\rangle = \eta_{(k_F + \frac{2\pi}{L})}^\dagger \eta_{(k_F - \frac{2\pi}{L})} |\text{GS}\rangle$, que em termos da notação $(h : p)$ é representada por $(1 : 1)$, esta corresponde à excitação (b) na Tabela 3.3. Como dito no Capítulo 2, esta é a menor excitação com momento não nulo do modelo XX, e tem excesso de energia e momento iguais a $2\pi v_s/L$ e $2\pi/L$, respectivamente [a excitação $(-1 : -1)$ é obviamente degenerada em energia, mas com momento $-2\pi/L$]. Como mostraremos subsequentemente, este estado também possui um excesso de emaranhamento ΔS_n não nulo, mesmo no limite termodinâmico, no qual o excesso de energia e momento desaparecem. Exemplos de outras excitações não-compactas são mostradas na Tabela 3.4.

representação compactada de Λ_k	$(h : p)$	(Q, β)	(j, j')	(Δ, s)	$(h, \bar{h})$	$X_{\Delta}^{j, j'}$
oooo ●●●●●●●● oooo	$(2 :)$	$(-1, -1)$	$(1, 0)$	$(\frac{5}{4}, 1)$	$(\frac{9}{8}, \frac{1}{8})$	$\frac{9}{4}$
oooo ●●●●●●●●o oooo	$(1 : 2)$	$(0, 0)$	$(2, 0)$	$(0, 0)$	$(0, 0)$	2
oooo ●●●●●●●● ●oooo	$(2 : 1)$	$(0, 0)$	$(2, 0)$	$(0, 0)$	$(0, 0)$	2
oooo ●●●●●●●● oooo	$(3 :)$	$(-1, -1)$	$(2, 0)$	$(\frac{5}{4}, 1)$	$(\frac{9}{8}, \frac{1}{8})$	$\frac{13}{4}$
oooo ●●●●●●●●o oooo	$(1, 5 :)$	$(2, -1)$	$(3, 0)$	$(5, -2)$	$(\frac{33}{2}, \frac{7}{2})$	8
oooo ●●●●●●●● oooo	$(2, 4 :)$	$(2, -1)$	$(3, 0)$	$(5, -2)$	$(\frac{33}{2}, \frac{7}{2})$	8

Tabela 3.4: Representação esquemática dos estados não-compactos considerados na Figura 3.2.3(b). Novamente mostramos os valores de Q , β , j , j' e $\Delta_{Q, \beta}$, $s_{Q, \beta}$. Por fim, na última coluna mostramos as dimensões anômalas $X_{\Delta_{Q, \beta}}^{j, j'}$ para cada excitação, note que estes valores não são consistentes com os valores de d^{r} [legenda da Figura 3.2.3(b)] que ajustam as curvas da referida figura à Eq. (1.4.12).

A Figura 3.2.3(b) foi reproduzida da Ref. [29], nela mostra-se o excesso da entropia de emaranhamento, no limite $\ell \ll L$, para os estados listados Tabela 3.4 de uma cadeia com $L = 10000$ sítios. Deste gráfico vemos claramente que $\Delta S_1 \neq 0$ e é sempre positivo. Estes estados obedecem à Eq. (1.4.9). Os valores de d^Υ consistentes com os ajustes à esta equação estão apresentados na legenda desta figura. Confrontando estes valores com as dimensões de escala de cada operador Υ , apresentado na Tabela 3.4, vemos que o número d^Υ não corresponde a dimensão de escala $X_\Upsilon = X_{Q,\beta}^{j,j'}$ conforme conjecturado pelos autores da Ref. [28]. Na inserção da Figura 3.2.3(b) considerou-se os estados $\eta_{(k_F + \frac{2m\pi}{L})}^\dagger \eta_{(k_F - \frac{2\pi}{L})} |\text{GS}\rangle$ com $m = 1, 2, \dots, 14$, de um sistema com $L = 8000$. Ou seja, a partícula mais próxima do ponto de Fermi à direita é deslocada m quantas de momento à direita, estes são representados por $(1, m)$. Verifique que este estado tem $Q = 0 = \beta$ ($\Delta_{Q,\beta} = 0 = s_{Q,\beta}$), $j = m$ e $j' = 0$, e portanto a dimensão de escala é $X_{Q,\beta}^{j,j'} = m$. No gráfico plota-se $\Delta S_1/m$, e para os diferentes valores de m todas as curvas colapsam-se de modo que temos $d^\Upsilon = m$ para estes casos.

De modo geral, estes resultados, claramente, evidenciam que $d^\Upsilon \neq X_\Upsilon$, e ainda parecem indicar que [30]

$$d^\Upsilon = j + j'. \quad (3.2.5)$$

A fim de confirmar a equação acima, na Figura 3.2.4 consideramos também diversos outros exemplos de estados excitados. Primeiramente, na Figura 3.2.4(a) mostramos o excesso de entropia de emaranhamento para diversos estados excitados com $Q = 0 = \beta$, no limite $\ell/L \ll 1$, i.e., provenientes de operadores descendentes do operador identidade. Nesta figura os estados são representados pela notação $(h : p)$, enquanto que na Tabela 3.5(a) listamos estes mesmos estados na representação esquemática de suas dispersões compactadas, os valores de j e j' também são exibidos. Os valores de d^Υ que ajustam nossos dados com a Eq. (1.4.9) são

(a)	(j, j')	(b)	(Q, β)	(j, j')	$X_\Delta^{j,j'}$
◀	◦ • ◦ • • • • • • • ◦ ◦	▶	◦ • • • • • • • • • ◦ ◦ ◦	(0, 1)	4 + 1
►	◦ • ◦ • • • • • • ◦ • ◦	▼	◦ • • ◦ • • • • • • • • ◦ ◦	(1, 1)	2 + 2
◆	◦ ◦ ◦ • • • • • • ◦ • ◦	▲	◦ • • • • • • • • • • ◦ • • • ◦	(1, 2)	8 + 3
▲	• ◦ ◦ • • • • • • ◦ • ◦	◆	◦ ◦ • ◦ • • • • • • • ◦ • ◦ ◦	(1, 3)	5 + 4
▼	◦ • • • ◦ • • • • • ◦ • ◦	◀	• ◦ ◦ ◦ • • • • • ◦ ◦ ◦ • ◦	(2, 3)	4 + 8
■	◦ • ◦ • • • • • • ◦ • •	■	◦ ◦ ◦ ◦ ◦ ◦ • • • • • ◦ ◦ ◦ ◦ • ◦ ◦	(5, 1)	5 + 12
●	◦ • ◦ • • • • • • • • ◦ •	●	◦ ◦ ◦ • ◦ ◦ • • • • • • • • • • ◦ ◦	(5, 2)	13 + 15

Tabela 3.5: Representação esquemática dos estados considerados na Figura 3.2.4. Os valores de j e j' são mostrados. Em (a) temos $Q = 0 = \beta$, e portanto $\Delta_{Q,\beta} = 0$. Em (b) indicamos os valores de Q e β para cada excitação, e também a dimensão de escala $X_\Delta^{j,j'} = \Delta_{Q,\beta} + (j + j')$. Os valores d^Υ usados para ajustar nossos dados à Eq. (1.4.12) estão dispostos entre parênteses na Figura 3.2.4. Note que, estes são dados pela Eq. (3.2.5).

mostrados entre parênteses na Figura 3.2.4, sendo estes valores dados pela Eq. (3.2.5). Já na Figura 3.2.4(b), exibimos novamente ΔS_1 , para $\ell/L \ll 1$ e $L = 40000$ sítios, entretanto todas as excitações consideradas têm Q não nulo. Na Tabela 3.5(b), temos a representação compactada de Λ_k destas excitações, bem como os valores de Q , β , j , j' e também da dimensão de escala $X_{\Delta_{Q,\beta}}^{j,j'} = \Delta_{Q,\beta} + (j + j')$. Note que os valores de d^{Υ} , entre parênteses, consistentes com nossos resultados são exatamente $j + j'$ [Eq. (1.4.9)] *não* incluindo a dimensão de escala da parte compacta da excitação ($\Delta_{Q,\beta}$).

Apesar da entropia de emaranhamento de vários estados (todos os estados com o mesmo valor de $j+j'$) coincidir no limite $\ell/L \ll 1$, isto não é mais verdade para ℓ/L em geral. Por exemplo, nas Figuras 3.2.4(a) e (b) foram considerados os seguintes estados $\eta_{-(k_F + \frac{2\pi}{L})}^\dagger \eta_{(k_F + \frac{2\pi}{L})}^\dagger \eta_{-k_F} \eta_{k_F} |\text{GS}\rangle$ e $\eta_{-(k_F + \frac{2\pi}{L})}^\dagger \eta_{(k_F + \frac{2\pi}{L})}^\dagger \eta_{(k_F + \frac{4\pi}{L})}^\dagger \eta_{-(k_F + \frac{2\pi}{L})} |\text{GS}\rangle$ associados com as excitações $(\pm 1 : \pm 1)$ e $(-2 : \pm 1, 2)$, respectivamente. Como estes dois estados tem $j + j' = 2$ [ver também as Tabelas 3.5(a) e (b)], o comportamento $\ell/L \ll 1$ de ΔS_1 para as duas excitações é o mesmo, i.e., $\Delta S_1 = (4\pi^2/3) (\ell/L)^2$. Entretanto, como pôde ser visto na inserção da Figura 3.2.4(a), na qual mostramos ΔS_1 para todos os sítios e $L = 400$, o comportamento do emaranhamento, destas diferentes excitações, somente colapsa na curva em vermelho, $\Delta S_1 = (4\pi^2/3) (\ell/L)^2$, para

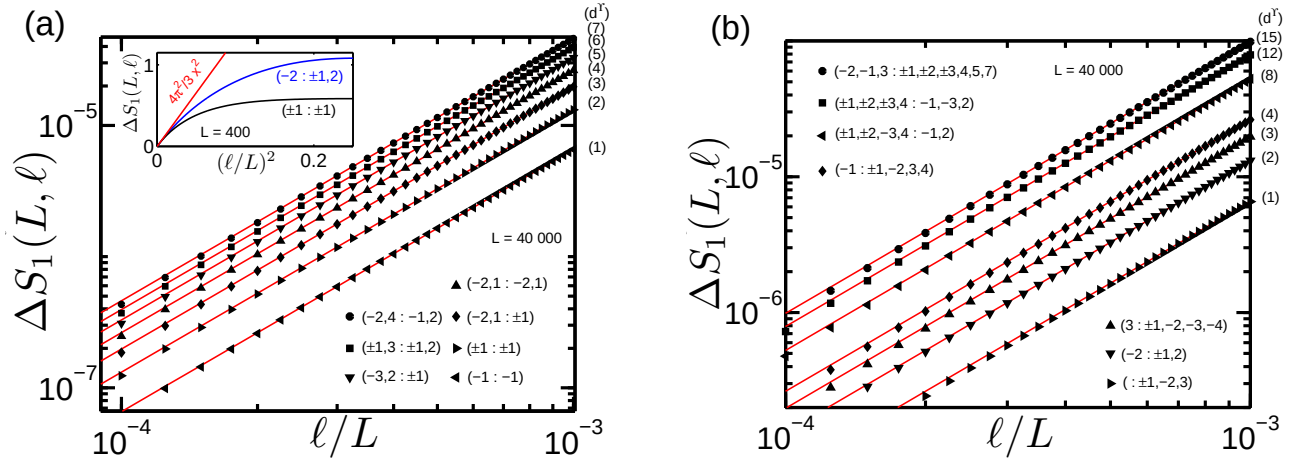


Figura 3.2.4: (a) Excesso de entropia de emaranhamento ΔS_1 no regime $\ell/L \ll 1$ para diversas excitações não-compactas, descendentes do operador identidade ($Q = 0 = \beta \rightarrow \Delta^1 = \Delta^{0,0} = 0$), em um sistema com $L = 40000$ sítios. Os valores de d^Υ que ajustam nossos dados são mostrados entre parênteses. (Inserção) Excesso de entropia de emaranhamento ΔS_1 para todos os sítios para as excitações $(\pm 1 : \pm 1)$ e $(-2 : \pm 1, 2)$, o sistema considerado tem tamanho $L = 400$. Vale notar que apesar de ΔS_1 , no regime $\ell/L \ll 1$, ser o igual para as duas excitações, Eq. (1.4.9) com $d^\Upsilon = 2$, suas entropias não coincidem para ℓ/L grande. (b) Comportamento $\ell/L \ll 1$ de ΔS_1 para excitações descendentes com $Q \neq 0$ e alguns valores de β em um sistema com $L = 40000$ sítios. Entre parênteses temos os valores d^Υ obtidos ajustando os nossos resultados.

$\ell/L \ll 1$. Contudo para ℓ/L grande as entropias não são mais iguais.

Consideraremos, daqui em diante, o excesso na entropia de Rényi ΔS_n , para excitações não-compactas e índice $n > 1$. Primeiramente, checamos o comportamento $\ell/L \ll 1$ da fórmula (1.4.8) para alguns exemplos de excitações com $d^{\mathcal{R}} > 1$ e $n > 1$. Mostramos o excesso de entropia ΔS_n , $n = 2, 3$ para excitações em uma cadeia com $L = 40000$ sítios na Figura 3.2.5. As excitações indicadas são dispostas na legenda, bem como na tabela ao lado do gráfico. Os valores de $d^{\mathcal{R}}$ usados para ajustar nossos dados às Eqs. (1.4.8) e (1.4.6) são dados por (3.2.5), como no caso da entropia de von Neumann, $n = 1$.

Estes resultados revelam que uma profunda análise da entropia de Rényi de estados excitados associados com os operadores descendentes precisa ser feita para que compreendamos o comportamento exato de S_n no regime $\ell/L \ll 1$. Abaixo, comentamos dois pontos que podem ajudar a inferir sobre a forma exata do fator $d^{\mathcal{R}}$ que aparece na Eq. (1.4.8).

Primeiro, note que a Eq. (1.4.8) foi obtida exatamente para operadores primários. Por exemplo, o operador $i\partial\phi$ é primário em termos da álgebra de Virassoro. Entretanto, para uma álgebra maior como a álgebra de Kac-Moody (que é a álgebra correta para a cadeia XXZ), o operador $i\partial\phi$ pode ser visto como um operador descendente. Portanto, o resultado da Eq. (1.4.8) é válido independentemente se o operador $i\partial\phi$ é primário o não. Segundo, nossos resultados sugerem que os operadores associados com configurações tais como as representadas nas Tabelas 3.5(b) e 3.2.3 [veja também Figura 3.2.5] podem ser expressos por um produto de operadores de vértex com dimensão de escala Δ vezes um produto de derivadas dos campos ϕ e $\bar{\phi}$ com dimensão de escala $j + j'$, e isto iria levar ao fator $d^{\mathcal{R}} = j + j'$ [conforme Eq. (3.2.5)] na Eq.

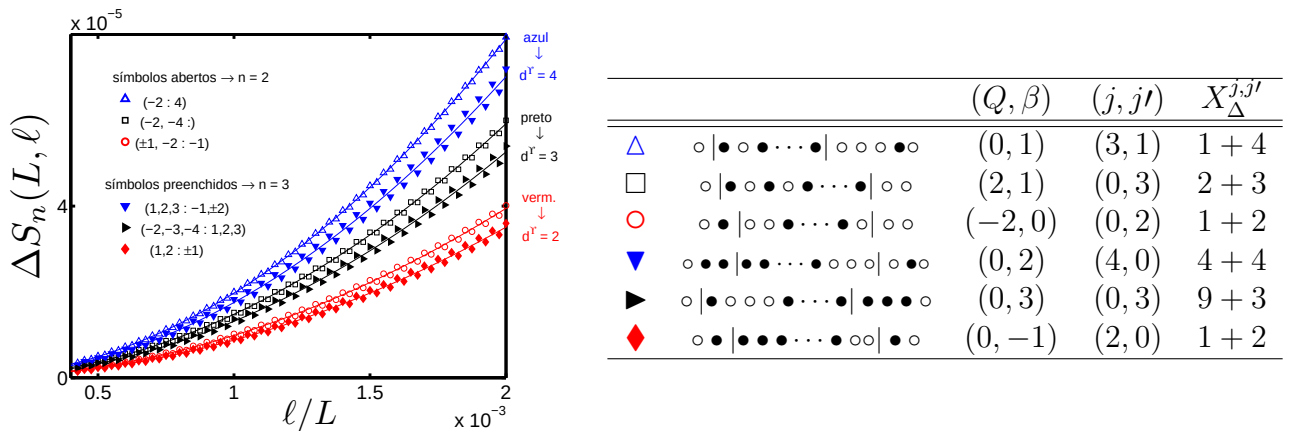


Figura 3.2.5: Comportamento do excesso da entropia de Rényi ΔS_n no regime $\ell/L \ll 1$, para $n = 2, 3$, $L = 40000$, e os estados excitados listados na tabela. Na tabela mostramos os valores de Q , β , j , j' e $X_{\Delta}^{j,j'}$. Os valores de $d^{\mathcal{R}}$ usados para ajustar nossos dados às Eqs. (1.4.6) e (1.4.8) são mostrados na legenda do gráfico e correspondem à Eq. (3.2.5).

(1.4.8) [30, 92]. Futuras investigações são necessárias para esclarecer a forma exata de S_n no limite $\ell/L \rightarrow 0$ para estados excitados gerais

Ulteriormente, examinaremos as excitações partícula-buraco feitas nos pontos de Fermi à direita $|\partial\phi\rangle$, à esquerda $|-i\partial\bar{\phi}\rangle$ e ambos os pontos $|\partial\phi\partial\bar{\phi}\rangle = ||\partial\phi|^2\rangle$. Estas excitações são representadas por $(1 : 1)$, $(-1 : -1)$ e $(\pm 1 : \pm 1)$, respectivamente. A quantidade $F_n^\Upsilon = e^{(1-n)\Delta S_n}$, para o operador $\Upsilon = i\partial\phi$ é dada, no limite termodinâmico, pelas Eqs. (1.4.10) e (1.4.11) e é a mesma para o conjugado $-i\partial\bar{\phi}$. De modo que para o operador $\Upsilon = |\partial\phi|^2$, a quantidade $F_n^{|\partial\phi|^2}$, é simplesmente o quadrado da expressão (1.4.10). E portanto, o excesso de entropia fica

$$\Delta S_n = n_{\text{p-h}} \frac{1}{1-n} \log F_n^\Upsilon, \quad (3.2.6)$$

sendo $n_{\text{p-h}}$ o número de excitações partícula-buraco feitas.

Na Figura 3.2.6(a), avaliamos ΔS_2 para as três excitações partícula-buraco, referidas acima, em um sistema com $L = 800$ sítios. Veja que nossos resultados estão em perfeito acordo com as Eqs. (1.4.12) e (3.2.6), as linhas contínuas em vermelho. Na inserção da esquerda desta

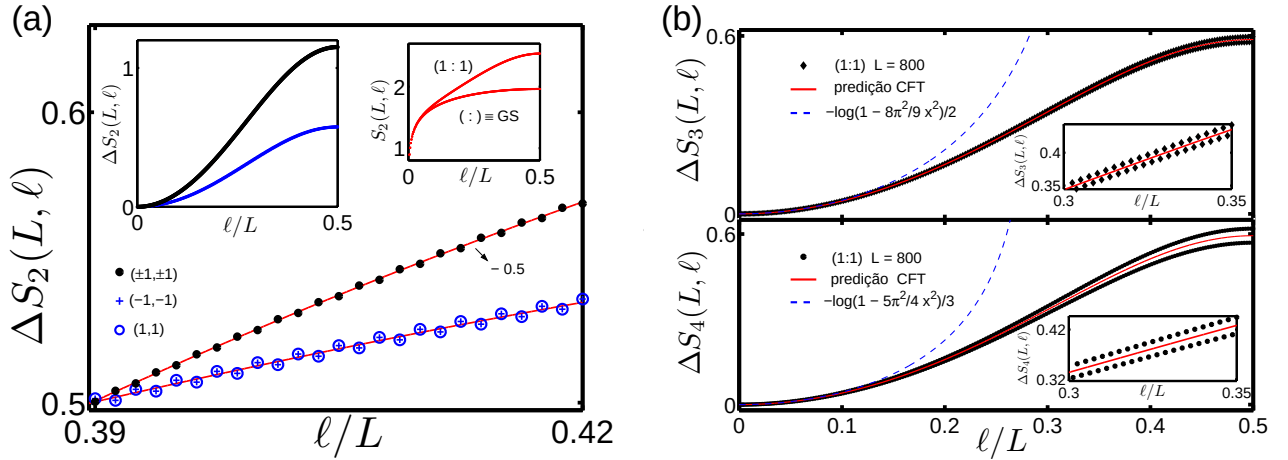


Figura 3.2.6: Excesso de entropia de Rényi ΔS_n vs ℓ/L para excitações partícula-buraco em uma cadeia com $L = 800$ sítios. (a) Consideramos a excitação partícula-buraco no ponto de Fermi à direita, à esquerda e em ambos, $(1 : 1)$, $(-1 : -1)$ e $(\pm 1 : \pm 1)$, respectivamente, para índice $n = 2$. As linhas contínuas correspondem ao limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$ previsto pela Eqs. (1.4.12) e (3.2.6). (Inserções) A inserção à esquerda mostra ΔS_2 para todos os sítios enquanto que a inserção à direita ilustra o comportamento da entropia de Rényi para o estado fundamental $(:)$ e para a excitação partícula-buraco à direita $(1 : 1)$. (b) ΔS_n para a excitação $(1 : 1)$. O gráfico superior (inferior) corresponde a $n = 3$ ($n = 4$). As linhas tracejadas são o limite para $\ell/L \ll 1$, dados pela Eq. (1.4.8), enquanto que as linhas contínuas são novamente a previsão das Eqs. (1.4.10) e (1.4.11), para $L \rightarrow \infty$. (Inserções) Ampliação, para melhor visualização, de parte dos respectivos gráficos principais.

figura temos o excesso de entropia ΔS_2 para todos os sítios. A nível ilustrativo, na inserção à direita, mostramos a entropia de Rényi do estado fundamental S_2^{GS} e do estado com a excitação partícula-buraco no ponto de Fermi à direita $S_2^{i\partial\phi}$.

Na Figura 3.2.6(b) apresentamos dados do estado $|i\partial\phi\rangle \equiv (1 : 1)$, na figura superior (inferior) temos o excesso de entropia deste estado para índice $n = 3$ ($n = 4$). Novamente consideramos uma cadeia de $L = 800$ sítios. As previsões das Eqs. (1.4.10), (1.4.11) e (3.2.6), para L infinito, são mostradas em linhas contínuas em vermelho, e salvo as oscilações em torno destas, os resultados apresentados estão em bom acordo com o esperado. As linhas pontilhadas azuis correspondem o limite quadrático da função $F_n^{i\partial\phi}$, no regime $\ell/L \ll 1$, dado pela Eq. (1.4.8) com $d^{i\partial\phi} = 1$.

Capítulo 4

Escada de duas-pernas com interação de três-*spins*

Neste capítulo apresentaremos nossas contribuições originais no avanço do entendimento das correções de tamanho finito da entropia de emaranhamento em sistemas de *spins*, os nossos principais resultados foram recentemente publicados na revista *Physical Review B* [30]. Estudamos, particularmente, estas correções para uma cadeia de duas-pernas com interação de três *spins* exatamente solúvel. Conforme veremos, subsequentemente, este modelo pertence à classe de modelos que são bem conhecidos por serem exatamente solúveis por uma transformação de Jordan-Wigner.

A hamiltoniana, definida em uma geometria de duas pernas, que consideramos é a seguinte

$$H_{2\text{leg}} = 2 \sum_{\alpha=x,y} \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{j=1}^L (J_{\lambda} s_{\lambda,j}^{\alpha} s_{\lambda+1,j+\lambda-1}^{\alpha} + J_3 s_{\lambda,j}^{\alpha} s_{\lambda+1,j+\lambda-1}^z s_{\lambda,j+1}^{\alpha}) - h \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{j=1}^L s_{\lambda,j}^z, \quad (4.0.1)$$

sendo J_j ($j = 1, 2, 3$) constantes de acoplamento [veja Figura 4.1.1(a)], $s_{\lambda,j}^{\alpha}$ ($\beta = x, y, z$) são operadores de spin-1/2 na perna $\lambda = 1, 2$ e degrau j , h é o campo magnético, e L é considerado par. Investigamos o modelo acima com PBC, i.e., $s_{\lambda,j+L}^{\alpha} = s_{\lambda,j}^{\alpha}$ e $s_{\lambda+2,j}^{\alpha} = s_{\lambda,j}^{\alpha}$. Modelos com interação *multispin* do tipo $s_j^{\alpha} \prod_{l=j+1}^m s_l^z s_{m+1}^{\alpha'}$ (com $\alpha, \alpha' = x, y$) podem ser mapeados em uma forma fermiônica quadrática ou biquadrática, como primeiramente notado por Suzuki [93]. Sendo assim, podemos utilizar o formalismo apresentado no Apêndice A.I para a diagonalizar esta hamiltoniana. Várias variantes da hamiltoniana (4.0.1), com interação de três-*spins*, têm sido consideradas na literatura [94–101]. É válido mencionar que hamiltonianas de spin-1/2 com interação de três-*spins* podem ser geradas em redes ópticas [102].

Os autores da Ref. [100] também investigaram o mesmo modelo por nós considerado, porém, focados nos efeitos da distorção de rede no sistema infinito. Diferentemente, nosso objetivo é

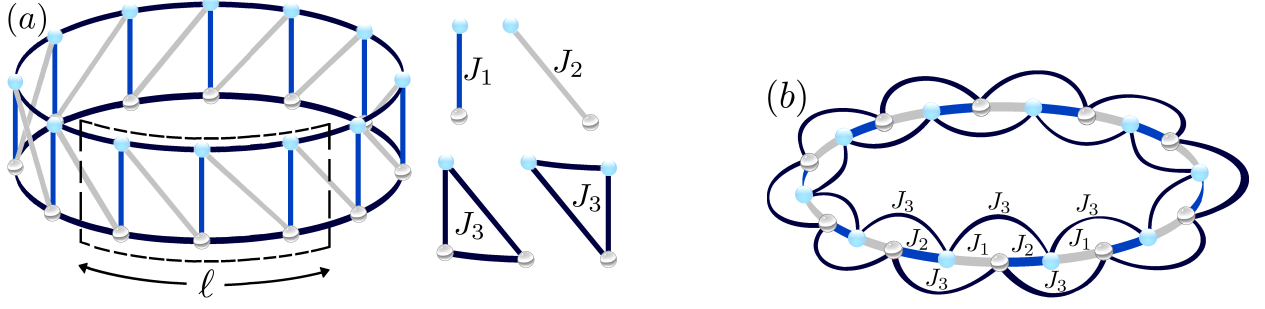


Figura 4.1.1: (a) Representação esquemática de uma escada de *spins* de duas pernas. J_1 , J_2 e J_3 são acoplamentos entre spins ao longo dos degraus, da diagonal e das plaquetas, respectivamente. Consideramos um sistema bipartido como o indicado na figura. O sistema de L degraus é dividido em dois subsistemas de tamanhos ℓ e $L - \ell$. (b) Os termos de *hopping* da hamiltoniana fermiônica (4.1.1).

determinar as correções de tamanho finito das energias e das entropias de emaranhamento associadas com vários estados.

Neste capítulo vamos inicialmente (Seção 4.1) descrever o procedimento para diagonalizar a hamiltoniana (4.0.1) de modo exato, bem como obteremos seu diagrama de fases. Na Seção 4.2, vamos determinar a entropia de Rényi do modelo utilizando o método padrão das correlações.

4.1 Diagrama de fases e propriedades críticas

A fim de transformar os operadores de *spin* da hamiltoniana (4.0.1) em operadores fermiônicos sem *spin* utilizamos a transformação de Jordan-Wigner [Eq. (2.1.1)], com $s_{\lambda,j}^\alpha = s_{\lambda+2(j-1)}^\alpha$, de modo que obtemos

$$H_{2\text{leg}} = \sum_{j=1}^{L-1} \left(J_1 c_{2j-1}^\dagger c_{2j} + J_2 c_{2j}^\dagger c_{2j+1} \right) - \sum_{j=1}^{2L-2} \frac{J_3}{2} c_j^\dagger c_{j+2} + J_1 c_{2L-1}^\dagger c_{2L} \\ - e^{i\pi\hat{\mathcal{N}}} \left[J_2 c_{2L}^\dagger c_1 - \frac{J_3}{2} \left(c_{2L-1}^\dagger c_1 + c_{2L}^\dagger c_2 \right) \right] + \text{h.c.} - h\hat{\mathcal{N}} + hL\mathbb{1}, \quad (4.1.1)$$

sendo $\hat{\mathcal{N}} = \sum_{n=1}^{2L} c_n^\dagger c_n$ o operador número. Note que o sistema original, na geometria de uma escada *zig-zag* de duas pernas com L degraus, e em operadores de *spins*, é mapeado em uma cadeia de férmions livres de $2L$ sítios. Esta última possui termos de *hoppings* alternados de primeiros vizinhos, e *hoppings* segundos vizinhos [veja Figura 4.1.1(b)].¹ Uma vez que a hamiltoniana (4.1.1) é quadrática, ela é um caso particular da hamiltoniana geral (A.0.1). O conjunto dos $2L$ operadores fermiônicos $\{\eta_k\}$ da transformação de Bogoliubov [Eq. (A.I.2)], que diagonaliza

¹Curiosamente esta figura apareceu na seção “Kaleidoscope” de agosto de 2012 da PRB.

a hamiltoniana (4.1.1), divide-se em dois conjuntos, dados por

$$\eta_k^\pm = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{j=1}^L e^{-ikj} \left(c_{2j-1} \pm \frac{J_1 + J_2 e^{-ik}}{|J_1 + J_2 e^{-ik}|} c_{2j} \right), \quad (4.1.2)$$

com a condição de contorno $c_{2L+j} = e^{i\varphi} c_j$, sendo $\varphi = 0 (\pi)$ para $\mathcal{N}$ ímpar (par).² Os vetores de onda são $k(n) = \frac{2n\pi + \varphi}{L}$, com $n \in \mathbb{Z}$ no intervalo $[-L/2, L/2)$. Podemos inverter a Eq. (4.1.2) e expressar os operadores c_j 's em termos dos novos operadores $\eta_k^\pm$'s, o resultado obtido é

$$c_{2j-1} = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{\{k\}} e^{ikj} (\eta_k^+ + \eta_k^-) \quad \text{e} \quad c_{2j} = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{\{k\}} e^{ikj} \frac{J_1 + J_2 e^{ik}}{|J_1 + J_2 e^{ik}|} (\eta_k^+ - \eta_k^-), \quad (4.1.3)$$

de modo que podemos expressar a hamiltoniana (4.1.1) na seguinte forma diagonal

$$H_{2\text{leg}} = \sum_{\sigma=\pm} \sum_{\{k\}} \left[\varepsilon^\sigma(k) \eta_k^{\sigma\dagger} \eta_k^\sigma + \frac{h}{2} \right], \quad (4.1.4)$$

na qual a banda de dispersão é dividida em dois ramos ($\sigma = \pm$) dados por

$$\varepsilon^\sigma(k) = -h - J_3 \cos k + \sigma |J_1 + J_2 e^{ik}|. \quad (4.1.5)$$

Portanto, podemos interpretar $\eta_k^\sigma (\eta_k^{\sigma\dagger})$ como o operador de aniquilação (criação) de uma partícula no ramo σ , com momento k e energia $\varepsilon^\sigma(k)$, e $\eta_k^{\sigma\dagger} \eta_k^\sigma$ é o operador número de ocupação do nível $\varepsilon^\sigma(k)$.

Quanto ao caso de campo magnético nulo, após uma exaustiva investigação das bandas de dispersão acima, notamos que dependendo dos acoplamentos J_1 , J_2 e J_3 , o perfil das bandas de dispersão apresenta três comportamentos distintos. As principais características destes perfis são retratados nas Figuras 4.1.2(a) - (c). Rotulamos as regiões dos acoplamentos como regiões I, II e III de acordo com os momentos de Fermi no limite termodinâmico. Na região I (II) temos quatro (dois) momentos de Fermi, enquanto que na região III os momentos de Fermi sempre aparecem em $k_F = \pm(\pi - \pi/L)$. Pode-se observar da Figura 4.1.2 que as regiões I e II possuem *gap* nulo no limite termodinâmico, enquanto que a região III sempre apresenta um *gap* finito. No último caso, a menor excitação está no setor $s_T^z = -1$, e o *gap* de spin é dado por $\Delta E = |J_1 - J_2| - J_3$.³ Na Figura 4.1.3, são mostradas estas regiões no espaço de parâmetros J_2/J_3 vs J_1/J_3 .

²Note que a transformação (4.1.2) é canônica, i.e., os operadores $\eta_k^\pm$ também são fermiônicos: $\{\eta_k^{\sigma\dagger}, \eta_{k'}^{\sigma'}\} = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{k,k'}$ e $\{\eta_k^\sigma, \eta_{k'}^{\sigma'}\} = 0$.

³Note que na região III, poderíamos ingenuamente esperar que ΔE tomasse valores negativos para algum acoplamento. Entretanto, isto não acontece, uma vez que o conjunto de acoplamentos tal que $\Delta E < 0$ não pertence à região III.

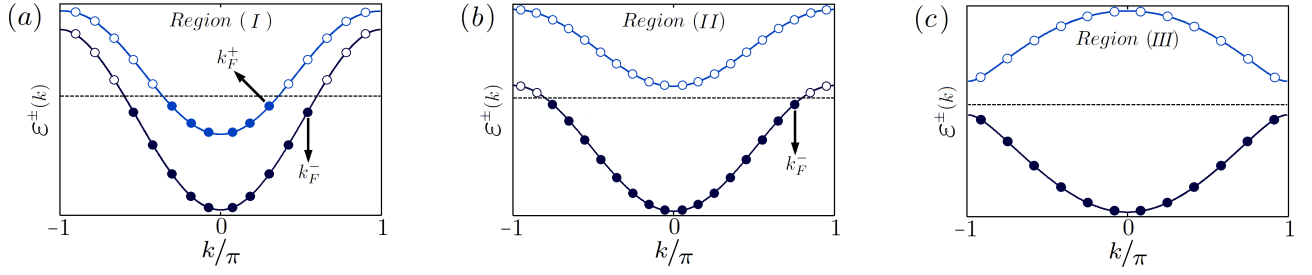


Figura 4.1.2: As figuras (a), (b) e (c) são os três perfis típicos da banda de dispersão (4.1.5), para $h = 0$, que correspondem às regiões (I), (II) e (III), respectivamente da Figura 4.1.3. $k_F^\pm$ são os momentos de Fermi em cada ramo $\sigma = \pm$.

É interessante notar também que, diferentemente da região III, na qual a magnetização é sempre nula se $h = 0$, nas regiões I e II a magnetização do estado fundamental é em geral não nula, dependendo das constantes de acoplamento. A magnetização por sítio é dada por $m = \frac{1}{2L} \sum_{\lambda,j} \langle \text{GS} | s_{\lambda,j}^z | \text{GS} \rangle = \frac{k_F^+ + k_F^-}{2\pi} - 1/2$ sendo os momentos de Fermi $k_F^\pm$ determinados, no limite termodinâmico, resolvendo as equações $\varepsilon^\pm(k_F^\pm) = 0$, e portanto são dados por

$$k_F^\pm = \arccos \left(\frac{J_1 J_2 - h J_3 \pm \sqrt{J_1^2 J_2^2 + J_1^2 J_3^2 + J_2^2 J_3^2 - 2 J_1 J_2 J_3 h}}{J_3^2} \right). \quad (4.1.6)$$

Em conformidade com as equações acima, vemos que para $h = 0$ a magnetização é, em geral, não nula, conforme já comentado. Na Figura 4.1.3, também mostramos os valores da intensidade da magnetização m no espaço de parâmetros.

Vamos agora investigar as regiões críticas I e II em mais detalhes. Primeiro definimos o vácuo tal que $\eta_k^\pm |\text{vácuo}\rangle = 0 \forall k$. Os autoestados da hamiltoniana são

$$|\Omega^+, \Omega^-\rangle = \prod_{\sigma=\pm} \prod_{k \in \Omega^\sigma} \eta_k^{\sigma\dagger} |\text{vácuo}\rangle, \text{ com energias } E_{\Omega^+, \Omega^-} = hL + \sum_{\sigma=\pm} \sum_{k \in \Omega^\sigma} \varepsilon^\sigma(k), \quad (4.1.7)$$

sendo $\Omega^\pm$ o conjunto de momentos ocupados no ramo $\varepsilon^\pm(k)$ da relação de dispersão. O momento total deste estado é

$$P_{\Omega^+, \Omega^-} = \sum_{\sigma=\pm} \sum_{k \in \Omega^\sigma} k. \quad (4.1.8)$$

Obviamente o estado fundamental da hamiltoniana (4.1.4) é obtido adicionando-se partículas nos níveis de energia abaixo de zero, i.e., $\Omega^\sigma = \{k(n) = \frac{2n\pi + \pi}{L} | \varepsilon^\sigma(k) \leq 0\}$. Note que o operador número pode ser escrito com $\hat{\mathcal{N}} = \hat{\mathcal{N}}^+ + \hat{\mathcal{N}}^-$, sendo $\hat{\mathcal{N}}^\sigma = \sum_{\{k\}} \eta_k^{\sigma\dagger} \eta_k^\sigma$, e portanto $\mathcal{N}^\sigma = \langle \hat{\mathcal{N}}^\sigma \rangle$ é o número de partícula no ramo ε^σ . Por simplicidade, vamos considerar que no estado fundamental $\mathcal{N}^+$ e $\mathcal{N}^-$ são ambos pares, e portanto

$$|\text{GS}\rangle = \prod_{\sigma=\pm} \prod_{k=\pi/L}^{k_F^\sigma} \eta_k^{\sigma\dagger} \eta_{-k}^{\sigma\dagger} |\text{vácuo}\rangle, \text{ com energias } E_0 = hL + \sum_{\sigma=\pm} \sum_{k=-k_F}^{k_F} \varepsilon^\sigma(k), \quad (4.1.9)$$

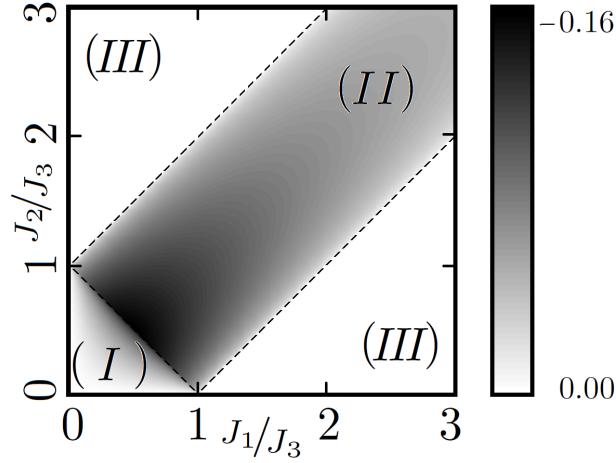


Figura 4.1.3: Diagrama de fases do estado fundamental para $h = 0$. As regiões I e II têm *gap* nulo, enquanto que a região III apresenta um *gap* finito. O painel à direita indica a intensidade da magnetização por sítio m .

na qual os momentos de Fermi (sistema finito) são $k_F^\sigma = (\mathcal{N}^\sigma - 1)\pi/L$.

A fim de determinar a classe de universalidade de comportamento crítico é necessário avaliarmos as correções de finito de E_0 , pois conforme vimos no Capítulo 1 estas correções são relacionadas com a carga central c [veja Eq. (1.2.1)]. Para um valor de densidade fixa $\rho = \mathcal{N}/2L$ a correção dominante pode ser obtida usando-se a fórmula de Euler-Maclaurin (2.2.16), que leva a

$$\frac{E_0}{L} = e_\infty - \frac{\pi(v_s^+ + v_s^-)}{6L^2} + o(L^{-3}), \quad (4.1.10)$$

sendo $v_s^\pm = \left. \frac{d\varepsilon^\pm}{dk} \right|_{k=2\pi\rho^\pm} = \left(J_3 \mp J_1 J_2 \left| J_1 + J_2 e^{2\pi i \rho^\pm} \right|^{-1} \right) \sin(2\pi\rho^\pm)$, $\rho^\sigma = \mathcal{N}^\sigma/2L$ a densidade de partículas no ramo ε^σ , e $e_\infty = e_\infty^+ + e_\infty^-$ a energia livre por sítio, com $e_\infty^\pm$ dado por $e_\infty^\pm = h \left(\frac{1}{2} - 2\rho^\pm \right) - \frac{J_3}{\pi} \sin(2\pi\rho^\pm) \pm \int_0^{2\pi\rho^\pm} \frac{dk}{\pi} |J_1 + J_2 e^{ik}|$. Note que o momento total [Eq. (4.1.8)] é nulo, $P = 0$.

Observe que a hamiltoniana (4.1.4) é composta por duas hamiltonianas desacopladas [cada uma associada a uma das bandas $\sigma = \pm$ da relação de dispersão (4.1.5)], por este motivo ela é descrita por duas CFT's não interagentes, como se vê pela Eq. (4.1.10). Os estados excitados são obtidos adicionando-se partículas (buracos) acima (abaixo) do nível de Fermi. Este processo é análogo ao empregado (detalhadamente) na Seção 2.2.1 para o modelo XX. Isto é, consideramos a seguinte excitação: (i) $Q_\pm$ ($|Q_\pm|$) partículas são adicionadas (removidas) na banda $\varepsilon^\pm$ acima (abaixo) do nível de Fermi, sendo $Q = Q_+ + Q_-$ a variação do número de partículas desta excitação [portanto Q dita a condição de contorno na hamiltoniana (4.1.1)]; (ii) e/ou podemos remover $|\beta_\pm|$ partículas nos níveis ocupados mais altos do ponto de Fermi à esquerda/direita da banda $\sigma = \pm$ e adicionar estas partículas nos níveis desocupados mais baixos do ponto de

Fermi à direita/esquerda da mesma banda $\sigma = \pm$. Os sinais de $Q_{\pm}$ e $\beta_{\pm}$ são convencionados do mesmo modo que foi feito no modelo XX (veja por exemplo a Figura 2.2.1). Na Figura 4.1.4, são apresentados alguns exemplos destas excitações para acoplamentos na região I do diagrama de fases (Figura 4.1.3), estas são, novamente, chamadas de excitações compactas, uma vez que não apresentam buracos no espaço de momentos. Para acoplamentos na região II, onde temos apenas um modo de *gap*-nulo, as excitações são as mesmas discutidas nos capítulos precedentes para o modelo XX. Note que o conjunto de momentos ocupados em cada ramo é dado por

$$\Omega^{\sigma} = \left\{ -k_F^{\sigma} - \frac{2\pi}{L} \left[\frac{Q_{\sigma}}{2} - \left(\beta_{\sigma} + \frac{\text{mod}Q + \delta_{\sigma}}{2} \right) \right], \dots, k_F^{\sigma} + \frac{2\pi}{L} \left[\frac{Q_{\sigma}}{2} + \left(\beta_{\sigma} + \frac{\text{mod}Q + \delta_{\sigma}}{2} \right) \right] \right\}, \quad (4.1.11)$$

sendo $\delta_{\sigma} = \text{mod}(\text{mod}Q + \text{mod}Q_{\sigma})$. Portanto, da Eqs. (4.1.7) e (4.1.8) juntamente com a fórmula de Euler-Maclaurin (2.2.16) encontramos que as energias são dadas por

$$E_{\{Q_{\sigma}, \beta_{\sigma}\}} = E_0 + \sum_{\sigma=\pm} \frac{2\pi v_s^{\sigma}}{L} \left[\frac{Q_{\sigma}^2}{4} + (\beta_{\sigma} + \delta_{\sigma}/2)^2 \right] + o(L^{-2}), \quad (4.1.12)$$

com momentos

$$P_{\{Q_{\sigma}, \beta_{\sigma}\}} = P_0 + \sum_{\sigma=\pm} \frac{2\pi}{L} Q_{\sigma} (\beta_{\sigma} + \delta_{\sigma}/2). \quad (4.1.13)$$

Lembrando que na região II se tem sempre $v_s^+ = 0$. Estas duas últimas expressões enfatizam que, de fato, a hamiltoniana (4.0.1) é descrita por duas teorias conformes *não interagentes*. Resultados similares foram encontrados em modelos com mais de um modo de *gap*-nulo [43, 103–107] .

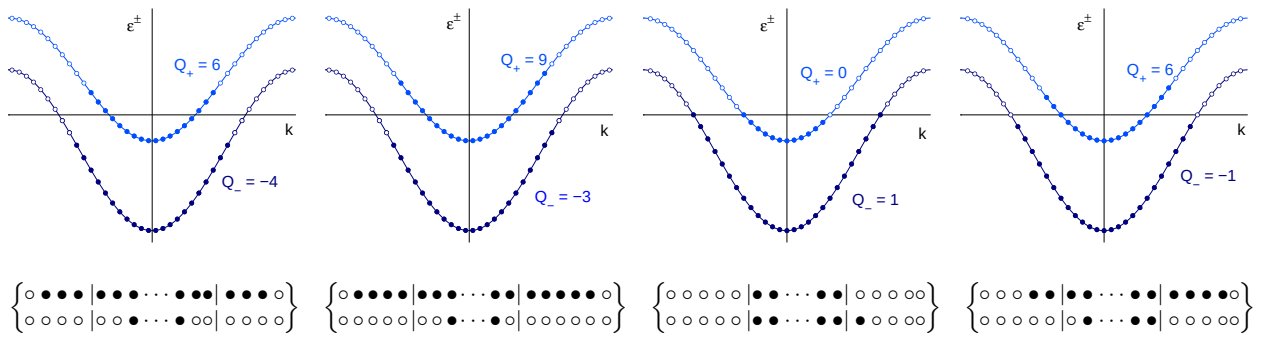


Figura 4.1.4: Representação esquemática de alguns estados excitados compactos com $\beta_{\pm} = 0$. Os círculos abertos (preenchidos) representam níveis desocupados (ocupados). Abaixo de cada banda de dispersão temos a representação compactada desta dispersão. A fileira de círculos superior (inferior), dentro do símbolo $\{$, denota o ramo ε^+ (ε^-) da dispersão, já as linhas verticais, as posições dos momentos de Fermi.. Mostramos apenas excitações para acoplamentos na região I, uma vez que na região II (ramo ε^+ completamente desocupado) as excitações são idênticas às discutidas no modelo XX (veja por exemplo a Tabela 3.3).

Comparando as Eqs. (4.1.10), (4.1.12) e (4.1.13) com as Eqs. (1.2.1) - (1.2.3) concluímos que $v_s^\pm$ são as velocidades do som associadas a cada ramo, e portanto identificamos a *carga central* $c = 1$ para cada modo de *gap*-nulo. Este valor de c implica que a classe de universalidade do comportamento crítico da hamiltoniana (4.0.1) é o mesmo da cadeia XX. Finalmente as dimensões de escala de cada modo são

$$\Delta_{Q_\sigma, \beta_\sigma}^\sigma = \frac{Q_\sigma^2}{4} + (\beta_\sigma + \delta_\sigma/2)^2, \text{ com } spin \text{ planar, } s_{Q_\sigma, \beta_\sigma}^\sigma = Q_\sigma (\beta_\sigma + \delta_\sigma/2),$$

que têm uma estrutura similar às dimensões de escala do modelo gaussiano [36, 46, 47] [veja também as Eqs. (1.2.8) e (1.2.9)]. Atente-se ao fato de que $\Delta_{0,1}^\sigma = \Delta_\epsilon = 1$ corresponde à dimensão de escala do operador energia, assim como na cadeia XY.

Finalmente deslocando a partícula mais próxima do ponto de Fermi à direita (esquerda), de cada ramo $\sigma = \pm$, em j_σ (j'_σ) quantas de momento à direita (esquerda), temos uma torre de estados acima de cada das energias (4.1.12). Estes estados têm energias e momentos dados por

$$\begin{aligned} \Delta E_{\{Q_\sigma, \beta_\sigma\}}^{\{j_\sigma, j'_\sigma\}} &= \sum_{\sigma=\pm} \frac{2\pi v_s^\sigma}{L} (\Delta_{Q_\sigma, \beta_\sigma}^\sigma + j_\sigma + j'_\sigma) + o(L^{-2}) \\ \Delta P_{\{Q_\sigma, \beta_\sigma\}}^{\{j_\sigma, j'_\sigma\}} &= \sum_{\sigma=\pm} \frac{2\pi}{L} (s_{Q_\sigma, \beta_\sigma}^\sigma + j_\sigma - j'_\sigma), \end{aligned} \quad (4.1.14)$$

sendo j_σ e j'_σ inteiros cujas degenerescências são dadas pela Eq. (2.2.13) (quantidade de partições inteiras de um número inteiro). E $X_{\{Q_\sigma, \beta_\sigma\}}^{\{j_\sigma, j'_\sigma\}} = \sum_{\sigma=\pm} (\Delta_{Q_\sigma, \beta_\sigma}^\sigma + j_\sigma + j'_\sigma)$ é a dimensão de escala do operador associado à excitação.

4.2 Entropia de emaranhamento

Estamos interessados, agora, nas correções de tamanho finito da entropia de Rényi, nas regiões críticas I e II. Uma vez que a hamiltoniana (4.0.1) pode ser mapeada em uma forma quadrática em operadores fermiônicos [Eq. (4.1.1)], podemos utilizar o formalismo do Apêndice A.II para calcular a entropia de Rényi através do método da matriz de correlação.

Note que, assim como no modelo XX, tem-se $\langle c_n^\dagger c_m^\dagger \rangle = 0 = \langle c_n c_m \rangle \forall m, n$ e para qualquer conjunto $\{\Omega^+, \Omega^-\}$. Então, é suficiente calcularmos a matriz de correlação $\mathcal{C}_{m,n} = \langle c_m^\dagger c_n \rangle$, cujos autovalores ω_q são relacionados com a entropia de Rényi pela Eq. (3.2.1).

Os elementos da matriz de correlação $\mathcal{C}_{m,n}$ para um estado arbitrário [veja Eqs. (4.1.3) e (4.1.7)] são

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{m,n}^{|\Omega^+, \Omega^-\rangle} \mathcal{C}_{2m, 2n} &= \frac{1}{2L} \sum_{\sigma=\pm} \sum_{\{k\}} e^{-ik(n-m)} \left\langle \eta_k^{\sigma\dagger} \eta_k^\sigma \right\rangle_{\Omega^+, \Omega^-} \\ \mathcal{C}_{2m-1, 2n}^{|\Omega^+, \Omega^-\rangle} &= \frac{1}{2L} \sum_{\sigma=\pm} \sigma \sum_{\{k\}} e^{-ik(n-m)} \frac{J_1 + J_2 e^{ik}}{|J_1 + J_2 e^{ik}|} \left\langle \eta_k^{\sigma\dagger} \eta_k^\sigma \right\rangle_{\Omega^+, \Omega^-}. \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

$$\mathcal{C}_{2m-1, 2n-1} = \mathcal{C}_{2m, 2n}, \text{ e } \mathcal{C}_{2m, 2n-1} = \mathcal{C}_{2m-1, 2n}^*$$

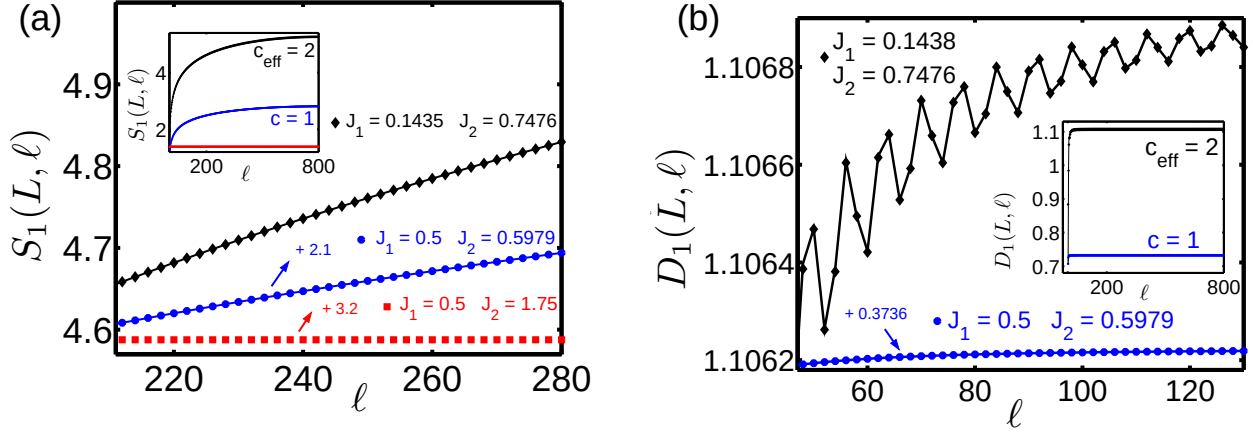


Figura 4.2.1: (a) Entropia de von Neumann $S_1(L, \ell)$ do estado fundamental de um sistema de tamanho $L = 800$, $h = 0$, $J_3 = 1$ e alguns valores de J_1 e J_2 (ver legenda). Os acoplamentos associados com os dados em preto, azul, e vermelho pertencem respectivamente às regiões I, II, e III do diagrama de fases da Figura 4.1.3. (b) Resultados da diferença $D_1(L, \ell)$ para os mesmos parâmetros da figura (a). Apenas alguns sítios são apresentados. As linhas sólidas nestas figuras conectam os pontos ajustados. A fim de mostrar todos os dados na figura alguns valores foram adicionados à S_1 e D_1 , como indicado pelas setas. (Inserções) S_1 e D_1 para todos os sítios.

Para o estado fundamental [Eq. (4.1.9)] temos

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{2m,2n}^{|\text{GS}\rangle} &= \frac{1}{2L} \frac{\sin(m-n)2\pi\rho^+ + \sin(m-n)2\pi\rho^-}{\sin\pi(m-n)/L} \\ \mathcal{C}_{2m-1,2n}^{|\text{GS}\rangle} &= -\frac{1}{2L} \sum_{k_F^+ < k \leq k_F^-} e^{-ik(n-m)} \frac{J_1 + J_2 e^{ik}}{|J_1 + J_2 e^{ik}|} . \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

Equações semelhantes também podem ser deduzidas para os estados excitados.

Assim como fizemos para o modelo XY, nas próximas subseções vamos determinar os autovalores da matriz de correlação $\mathcal{C}_{m,n}$, numericamente, a fim de obtermos a entropia de Rényi do estado fundamental, bem como de estados excitados.

4.2.1 Estado fundamental

Vamos começar considerando a entropia de Rényi do estado fundamental. Na Figura 4.2.1(a), mostramos a entropia de von Neumann S_1 como uma função de ℓ para sistemas de tamanho $L = 800$, $h = 0$ e três conjuntos de acoplamentos (J_1, J_2, J_3) . Estes conjuntos de acoplamentos ilustram o comportamento de S_1 nas três distintas regiões do diagrama de fases retratado na Figura 4.1.3. Como pode ser observado, na região com *gap* (região III) a entropia de von Neumann tende para uma constante, como esperado. Em contra partida, para as regiões críticas I e II, S_1 aumenta em acordo com a predição da CFT [veja Eq. (1.4.2) e (1.4.4)]. As linhas

preta/azul na Figura 4.2.1(a) são os ajustes dos nossos dados usando a Eq. (1.4.4). Note que a escada de duas pernas possui $2L$ sítios, por esta razão devemos fazer $L \rightarrow 2L$ nesta equação. A carga central c obtida através destes ajustes é $c = 1.00001$ ($c_{\text{eff}} = 2.00021$) para o conjunto de acoplamentos localizado na região crítica II (I). Resultados similares foram obtidos para diversos outros conjuntos de acoplamentos destas duas regiões distintas. Estes resultados mostram que para a região II, a física de baixas-energias é descrita por uma CFT com carga central $c = 1$, como já havíamos predito [ver Eq. (4.1.10)]. É interessante notar que na região I, na qual existem dois modos de *gap*-nulo (ao invés de um como na região II), obtemos uma carga central efetiva $c_{\text{eff}} = 2$. Este resultado assemelha-se ao resultado encontrado para a correção de energia do estado fundamental [ver Eq. (4.1.10)]. Entretanto, diferentemente das correções das energias, a entropia não depende das velocidades do som. Então, esperamos que cada modo de *gap*-nulo contribua para a correção de tamanho finito da entropia como na Eq. (1.4.4). Por esta razão, obtemos $c_{\text{eff}} = 2c$ nesta região. De um modo geral, esperamos que $c_{\text{eff}} = n_{\text{gnulo}}c$, sendo n_{gnulo} o número de modos de *gap*-nulo.

De modo que, o termo dominante da entropia de Rényi do estado fundamental comporta-se assintoticamente como

$$S_n(L, \ell) = \frac{c_{\text{eff}}}{6} \left(1 + \frac{1}{n}\right) \log \left[\frac{2L}{\pi} \sin \left(\frac{\pi \ell}{2L} \right) \right] + c'_n, \quad (4.2.3)$$

i.e., fazemos $c \rightarrow c_{\text{eff}}$ na Eq. (1.4.4). A fim de observar melhor as correções subdominantes nas entropias [Eq. (1.4.5)] deste sistema, é conveniente redefinirmos a Eq. (3.0.2), trocando também $c \rightarrow c_{\text{eff}}$, assim definimos

$$D_n(L, \ell) = S_n(L, \ell) - \frac{c_{\text{eff}}}{6} \left(1 + \frac{1}{n}\right) \log \left[\frac{2L}{\pi} \sin \left(\frac{\pi \ell}{2L} \right) \right], \quad (4.2.4)$$

na qual $c_{\text{eff}} = 1(2)$ na região II(I). De acordo com a Eq. (1.4.5) é esperado que

$$D_n(L, \ell) = c_n' + \frac{a_1 \delta_{n,1} + g_n(1 - \delta_{n,1}) \cos(\kappa \ell + \theta)}{\left| L \sin \left(\frac{\pi \ell}{2L} \right) \right|^{p_n}}. \quad (4.2.5)$$

Na Figura 4.2.1(b), mostramos a diferença D_1 para os dois conjuntos de acoplamentos da Figura 4.2.1(a). Um interessante e não trivial comportamento observado na entropia de von Neumann na região I é que ela apresenta oscilações não esperadas. Até então, pensava-se que oscilações ocorriam apenas nas entropias de Rényi S_n com $n > 1$, de fato como discutido no Capítulo 3, Xavier e Alcaraz [74] conjecturam, a partir do estudo de diversos modelos com apenas um modo de *gap*-nulo, que a entropia de von Neumann, em sistemas bipartidos, não deveria apresentar estas oscilações. Se $J_1 \neq J_2$, oscilações entre sítios pares e ímpares aparecem naturalmente na entropia. Diferentemente, a oscilação observada na Figura 4.2.1(b) para os acoplamentos da região I está presente mesmo para $J_1 = J_2$, ou seja não é devido à dimerização;

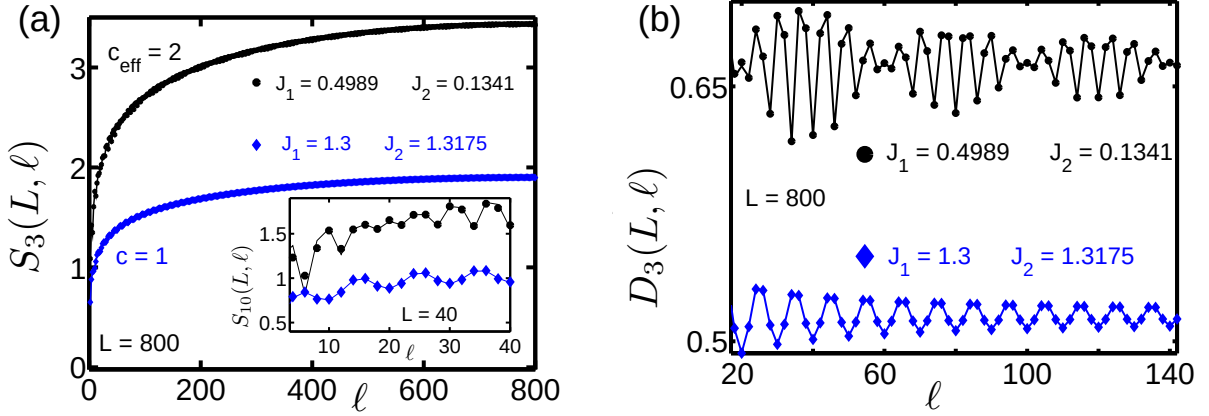


Figura 4.2.2: (a) Entropia de Rényi do estado fundamental de um sistema de tamanho $L = 800$, $h = 0$, $J_3 = 1$, e $n = 3$, e dois valores de J_1 e J_2 (ver legenda). Os acoplamentos associados com os dados em preto, e azul, estão localizados nas regiões I, e II, respectivamente (veja Figura 4.1.3). (Inserção) Resultados para $L = 40$ e $n = 10$. (b) A diferença $D_3(L, \ell)$ para os mesmos parâmetros da figura (a). Apenas alguns sítios são apresentados. Os símbolos sólidos em (a) e (b) são os dados numéricos e as linhas sólidas conectando-os são os ajustes.

sendo assim, a conjectura, acima citada, parece não se aplicar em sistemas com mais de um modo de *gap*-nulo. Outra conjectura feita por aqueles autores é de que a correção de tamanho finito subdominante da entropia de von Neumann decai com o expoente $p_1 = 2$. De fato, observamos este decaimento na região II. A linha em azul na Figura 4.2.1(b) é o ajuste dos nossos dados assumindo-se que D_1 se comporta como na Eq. (4.2.5). O expoente que obtivemos a partir deste ajuste foi $p_1 = 2.0001$, em acordo com a conjectura supracitada.

Na região II, com dois modos de *gap*-nulo, ajustamos nossos dados assumindo que D_1 tem um termo oscilatório diferente do contido na Eq. (4.2.5). E também não é uma soma das oscilações de cada modo individual, mas sim uma nova forma. A fim de ajustar nossos dados nesta região, trocamos $g_1(1 - \delta_{n,1})\cos(\kappa\ell + \theta)$ na Eq. (4.2.5) pelo seguinte termo $g_1 \cos(k_F^-\ell) + g_1^{(2)} \cos(k_F^+\ell) + g_1^{(3)} \cos\left(\frac{k_F^- + k_F^+}{2}\ell\right) + g_1^{(4)} \cos\left(\frac{k_F^- - k_F^+}{2}\ell\right)$. Usando este termo oscilante, somos capazes de ajustar nossos dados perfeitamente, como mostrado na Figura 4.2.1(b). O expoente obtido neste caso foi $p_1 = 2.0007$. Resultados similares foram observados para diversos outros conjuntos de acoplamentos. Subsequentemente, daremos a motivação para termos considerados o padrão de oscilação acima. Estes resultados indicam que o termo subdominante da correção na entropia de von Neumann é de fato governado pelo expoente $p_1 = 2$, mesmo para modelos com mais de um modo de *gap*-nulo.

Vamos agora considerar as entropias de Rényi do estado fundamental com $n > 1$. Como ilustração, na Figura 4.2.2(a) apresentamos $S_n(L, \ell)$ como função de ℓ para sistemas com ta-

manhos $L = 800$ e $L = 40$, dois valores de n , e alguns acoplamentos. Nos casos que $n > 1$, são esperadas oscilações na entropia com condições de contorno periódicas [72, 74], conforme mencionado na Seção 1.4 [veja também o Capítulo 3]. Além disso, é esperado que as amplitudes das oscilações diminuam quando o sistema aumenta. De fato, este comportamento é claramente notado no sistema com menor tamanho, mostrado na inserção da Figura 4.2.2(a).

Novamente, para observarmos melhor estas oscilações, investigamos a diferença $D_n(L, \ell)$. Mostramos na Figura 4.2.2(b) D_3 vs ℓ , para os mesmos dados apresentados na Figura 4.2.2(a). Vamos primeiramente discutir os dados da entropia de Rényi na região II (que possui um modo de *gap*-nulo). Nesta região, fomos capazes de ajustar nossos dados com a Eq. (4.2.5) com $\kappa = k_F^-$ e $\theta = 0$. O expoente que obtivemos deste ajuste foi $p_3 = 0.666$. Ajustes similares para D_n (não mostrados) para $n = 2$ e 4 deram $p_2 = 0.999$ e $p_4 = 0.497$, respectivamente. Estes resultados indicam que $p_n = 2/n$, assim como na cadeia XY.

Por outro lado, não é possível ajustar nossos resultados da entropia de Rényi, na região I, se considerarmos que as oscilações se comportam apenas como $\cos(\kappa\ell + \theta)$, como foi feito na região II. A fim de obtermos alguma compreensão sobre estas oscilações na região I, calculamos analiticamente a função de correlação *spin-spin* do estado fundamental $\langle s_{2n}^z s_{2(n+\ell)}^z \rangle_{\text{GS}}$. Note, primeiramente, que

$$\langle s_i^z s_j^z \rangle = \left\langle \left(c_i^\dagger c_i - \mathbb{1}/2 \right) \left(c_j^\dagger c_j - \mathbb{1}/2 \right) \right\rangle = \delta_{i,j} \langle c_i^\dagger c_j \rangle + \left(\langle c_i^\dagger c_i \rangle - 1/2 \right)^2 - \left| \langle c_i^\dagger c_j \rangle \right|^2$$

$$\therefore \langle s_{2n}^z s_{2(n+\ell)}^z \rangle = m^2 - |\mathcal{C}_{2n,2(n+\ell)}|^2, \text{ para } \ell \neq 0,$$

na qual usamos o teorema de Wick (veja por exemplo [108]) e a Eq. (2.1.2). Portanto da Eq. (4.2.2) temos

$$\langle s_{2n}^z s_{2(n+\ell)}^z \rangle_{\text{GS}} = m^2 - \frac{1 - \frac{1}{2} \cos(k_F^- \ell) - \frac{1}{2} \cos(k_F^+ \ell) - \cos\left(\frac{k_F^- + k_F^+}{2} \ell\right) + \cos\left(\frac{k_F^- - k_F^+}{2} \ell\right)}{4L^2 \sin^2(\pi\ell/2L)}.$$

Motivados pelo fato de que se é esperado que as oscilações da entropia parecem ser associadas com a natureza antiferromagnética da hamiltoniana [70], assumimos que a diferença $D_n(L, \ell)$ se comporta como

$$D_n(L, \ell) = c'_n + \frac{a_1 \delta_{n,1} + g_n \cos(k_F^- \ell) + g_n^{(2)} \cos(k_F^+ \ell) + g_n^{(3)} \cos\left(\frac{k_F^- + k_F^+}{2} \ell\right) + g_n^{(4)} \cos\left(\frac{k_F^- - k_F^+}{2} \ell\right)}{|L \sin\left(\frac{\pi\ell}{2L}\right)|^{p_n}}. \quad (4.2.6)$$

De fato, como ilustrado na Figura 4.2.2(b), obtemos um bom ajuste dos nossos resultados se assumirmos que D_3 se comporta como a equação acima. O expoente que obtivemos a partir deste ajuste foi $p_3 = 0.667$.

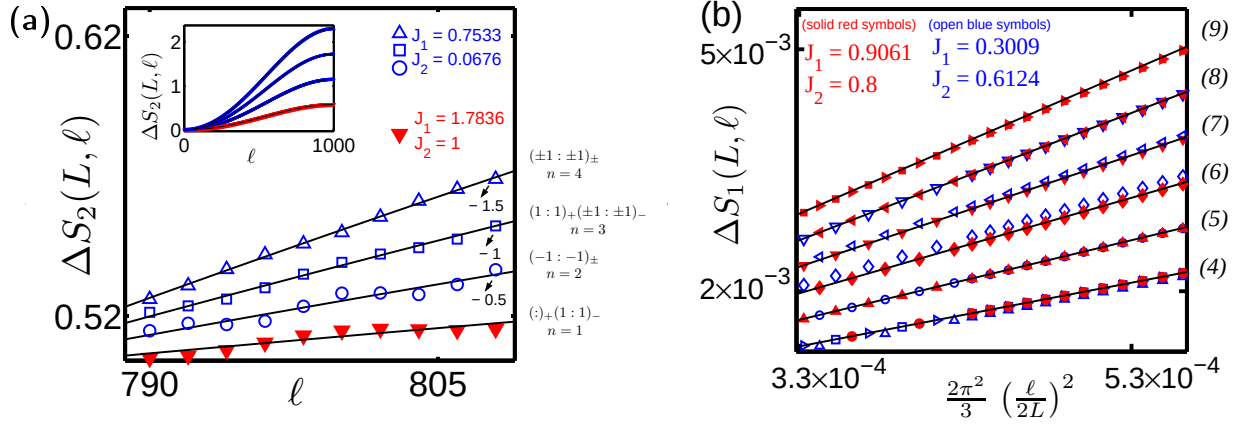


Figura 4.2.3: (a) ΔS_2 vs ℓ para algumas excitações partícula-buraco para um sistema de tamanho $L = 1000$, $h = 0$, $J_3 = 1$, e dois valores de J_1 e J_2 . Os símbolos são os dados numéricos e as curvas sólidas são os ajustes dos dados com a Eq. (3.2.6). As curvas sólidas a partir do topo tem valor de n_{p-h} : 4, 3, 2, e 1. Os símbolos em azul (vermelho) são dados de acoplamentos na região I (II). Apenas alguns sítios são mostrados. A fim de mostrar todos os dados na mesma figura, foram adicionadas algumas constantes nos valores ΔS_2 , como indicado pelas setas. Também apresentamos as excitações em termos da notação da Eq. (3.2.4). (Inserção) ΔS_2 para todos os sítios. (b) ΔS_1 vs $(\ell/2L)^2$ para diversas excitações de um sistema de tamanho $L = 10000$.

Resultados similares aos apresentados acima, foram obtidos para diversos outros valores de m e parâmetros de acoplamentos. Os resultados obtidos para alguns valores de n indicam que o expoente $p_n = 2/n$, como acontece na cadeia XY [72] (ver também o Capítulo 3). Foi conjecturado que o expoente p_n está relacionado à dimensão de escala do operador energia Δ_ϵ por $p_n = 2\Delta_\epsilon/n$ [74]. Nossos resultados também estão de acordo com esta conjectura, pois $\Delta_\epsilon = 1$ no presente modelo.

4.2.2 Estados excitados

Finalmente, consideraremos as entropias de Rényi de estados excitados, seguiremos basicamente o mesmo caminho que fizemos na Seção 3.2.2 para o modelo XX. Veremos que os resultados para o comportamento da entropia de Rényi associados com excitações compactas estão em acordo com as previsões das Refs. [28, 29]. Já os resultados associados com as excitações não-compactas diferem ligeiramente destas previsões e serão interpretados de modo idêntico ao feito na Seção 3.2.2.

Primeiramente, consideramos as entropias de Rényi para excitações compactas. Na Figura 4.1.4 já mostramos alguns exemplos de excitações compactas na região I com $\beta_\pm = 0$. Para estas excitações, bem como para diversas outras (inclusive com $\beta_\pm \neq 0$) nas duas regiões críticas, I e II, encontramos que $\Delta S_n = S_n^{\text{exc}} - S_n^{\text{GS}} \lesssim 10^{-3}$ para vários parâmetros em um sistema com

$L = 1000$. Estes resultados estão em conformidade com a predição, dos autores da Ref. [28, 29], que $S_n^{\text{exc}} = S_n^{\text{GS}}$, no limite termodinâmico.

Como discutido nos Capítulos 1 e 3, as entropias de Rényi associadas com excitações não-compactas são, em geral, diferentes daquela do estado fundamental. De fato, para estados excitados não-compactos, é esperado um excesso de entropia em relação ao estado fundamental, e diferentemente do excesso de energia e de momento, este excesso de entropia não desaparece no limite termodinâmico.

Vamos primeiramente considerar a excitação partícula-buraco feita no ponto de Fermi à direita/esquerda do ramo σ da dispersão. Na Figura 4.2.3(a), apresentamos ΔS_2 em função de ℓ para algumas destas excitações para um sistema de $2L$ sítios ($L = 1000$). Como observado nesta figura, a entropia de Rényi associada com estas excitações não-compactas aumenta com

Região II						
			(Q_-, β_-)	j_-		
●	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \dots \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \mid \circ \circ \circ \bullet \circ \circ \circ \end{array} \right\}$	$(:)_+(1 : 4)_-$	$(0, 0)$	4		
▲	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \dots \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \mid \circ \circ \circ \bullet \circ \circ \end{array} \right\}$	$(:)_+(1 : 5)_-$	$(0, 0)$	5		
◆	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \dots \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \mid \circ \circ \circ \bullet \circ \circ \end{array} \right\}$	$(:)_+(1 : 6)_-$	$(0, 0)$	6		
▼	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \dots \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \mid \bullet \bullet \circ \circ \end{array} \right\}$	$(:)_+(1, 3 : 1, 2, 3)_-$	$(1, 0)$	7		
◀	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \dots \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \mid \bullet \bullet \bullet \circ \end{array} \right\}$	$(:)_+(1, 2 : 1, 2, 3, 4)_-$	$(2, 1)$	8		
▶	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \dots \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \mid \circ \circ \bullet \bullet \circ \end{array} \right\}$	$(:)_+(2 : 4, 5)_-$	$(1, 0)$	9		
■	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \dots \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \mid \bullet \bullet \bullet \circ \end{array} \right\}$	$(:)_+(1, 2, 3 : 1, 2, 3)_-$	$(0, 0)$	9		
Região I						
			(Q_+, β_+)	(Q_-, β_-)	j_+	j_-
□	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \end{array} \right\}$	$(1, 2 : 1, 2)_+(:)_-$	$(0, 0)$	$(0, 0)$	4	0
▷	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \end{array} \right\}$	$(:)_+(1, 2 : 1, 2)_-$	$(0, 0)$	$(0, 0)$	0	4
△	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \end{array} \right\}$	$(1, 2 : 1)_+(1 : 1, 2)_-$	$(1, 0)$	$(-1, 0)$	2	2
○	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \end{array} \right\}$	$(1 : 1)_+(1, 2 : 1, 2)_-$	$(0, 0)$	$(0, 0)$	1	4
◇	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \end{array} \right\}$	$(1 : 1, 2, 3)_+(1, 2, 3 : 1)_-$	$(2, 1)$	$(-2, -1)$	3	3
◁	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \end{array} \right\}$	$(3 : 1, 2)_+(1, 2 : 2)_-$	$(1, 0)$	$(-1, -1)$	4	3
▽	$\left\{ \begin{array}{c} \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \\ \circ \mid \bullet \dots \bullet \circ \circ \mid \bullet \bullet \circ \end{array} \right\}$	$(1, 2 : 1, 2)_\pm$	$(0, 0)$	$(0, 0)$	4	4

Tabela 4.1: Representação esquemática de alguns estados excitados não-compactos. Novamente, os círculos abertos (preenchidos) representam níveis desocupados (ocupados). Apresentamos, também, as excitações em termos de Q_σ e β_σ [veja Eq. (4.1.14)] e também em termos da notação da Eq. (3.2.4). No último caso $(-h_1^L, -h_2^L, \dots, h_1^R, h_2^R, \dots : -p_1^L, -p_2^L, \dots, p_1^R, p_2^R, \dots)_\sigma$ representa um estado com buracos nos h_j^L 's (h_j^R 's) valores de momento permitidos abaixo do ponto de Fermi à esquerda (direita) do ramo σ e partículas nos p_i^L 's (p_i^R 's) valores de momento permitidos acima deste.

ℓ . Além disso, nossos resultados podem ser completamente ajustados pelas Eqs. (1.4.12) e (3.2.6). As curvas sólidas pretas correspondem a um ajuste dos nossos dados. As Eqs. (1.4.8) - (1.4.12) foram determinadas analiticamente para no caso de apenas um modo de *gap*-nulo. Em particular para uma teoria com dois campos ϕ^σ ($\sigma = \pm$) desacoplados elas continuam válidas.

Finalmente, consideremos $\Delta S_1 = S_1^{\text{exc}} - S_1^{\text{GS}}$ para diversas excitações não-compactas. Neste sentido, focamo-nos no comportamento de ΔS_1 no regime $\ell/L \ll 1$. Neste regime é esperado que ΔS_1 , para um sistema com $2L$ sítios, se comporte como na Eq. (1.4.9) apenas trocando $L \rightarrow 2L$. Na Figura 4.2.3(b), ΔS_1 é mostrada em função de $\frac{2\pi^2}{3} \left(\frac{\ell}{2L}\right)^2$ para diversas excitações não-compactas, no regime $\ell/L \ll 1$ para um sistema com $2L$ sítios ($L = 10000$). A representação esquemática destas excitações é apresentada na Tabela 4.1, na qual indicamos os valores de Q_σ , β_σ e j_σ ($j'_\sigma = 0$, nestes exemplos). Também mostramos estas excitações em termos das posições dos buracos e partículas $(h : p)_\sigma$ [ver Eq. (3.2.4)] criados a partir do estado fundamental. Os valores de d^Υ que ajustam nossos resultados à Eq. (1.4.9) estão dispostos entre parênteses à direita de cada curva na Figura 4.2.3(b). Como pode ser observado, os valores de d^Υ que são consistentes com nossos dados são $d^\Upsilon = \sum_{\sigma=\pm} (j_\sigma + j'_\sigma)$ (compare os valores nesta figura com os valores de $j_\pm$ exibidos na Tabela 4.1). Este resultado de d^Υ é análogo ao resultado que já havíamos encontrado para o modelo XX [Eq. (3.2.5)], que possui apenas um modo de *gap*-nulo. Conforme já enfatizamos, este resultado é levemente diferente do esperado pelos autores [28, 29], sendo d^Υ suposto ser a dimensão de escala $X_{\{Q_\sigma, \beta_\sigma\}}^{\{j_\sigma, j'_\sigma\}}$ do operador associado à excitação feita.

Conclusões e comentários finais

Nesta dissertação estudamos alguns modelos exatamente solúveis via transformação de Jordan-Wigner. Uma vez que nosso interesse era analisar estes sistemas próximos de seus pontos críticos, no Capítulo 1, um resumo de alguns conceitos básicos/fundamentais sobre fenômenos críticos foi apresentado.

No Capítulo 2, fizemos uma profunda análise do espectro de energias do bem conhecido modelo XY unidimensional em um campo magnético externo transversal. Utilizando os resultados do Apêndice A.I, foi possível resolver de modo exato o modelo supracitado, e também, determinar o diagrama de fases do mesmo. Como é bem estabelecido, dependendo de seus parâmetros,⁴ o modelo pode ser crítico [$(\gamma = 0, h \leq 1)$ e $h = 1$] ou não crítico. Para as regiões críticas e invariantes conforme, mediante às correções de tamanho finito das energias, constatamos que os valores exatos das cargas centrais são $c = 1$ e $c = 1/2$ para $(\gamma = 0, h < 1)$ e $(\gamma \neq 0, h = 1)$, respectivamente [veja o diagrama de fases do modelo apresentado na Figura 2.1.1(c)]. Encontramos também o conjunto completo das dimensões escalares dos operadores primários da CFT adjacente: para o modelo XX ($c = 1$) tem-se infinitos operadores primários, com a mesma estrutura do modelo gaussiano [compare a Eq. (2.2.12) com as Eq. (1.2.2), (1.2.3) e (1.2.9)]; por outro lado, para o chamado campo magnético crítico ($h_c = 1$), o modelo está na mesma classe de comportamento crítico do modelo de Ising, $c = 1/2$, e portanto existem apenas três operadores primários na CFT adjacente [conforme as Eqs. (1.2.6) e (1.2.7)].

O Capítulo 3 foi também devotado à cadeia XY, entretanto, nosso foco foi na entropia de Rényi do estado fundamental, bem como de estados excitados.⁵ Primeiramente, verificamos a validade da Lei Entrópica da Área para sistemas não críticos (e.g.: Figura 3.1.1). Em contrapartida, para as regiões críticas e invariantes conforme, vimos explicitamente que tal lei é violada, e ainda, que esta violação obedece à previsão universal da CFT [Eqs. (1.4.3) - (1.4.5)]. Utilizando tal previsão estimamos as cargas centrais por meio da entropia de von Neumann do estado estado fundamental, em perfeito acordo com os valores exatos encontrados no Capítulo 2. Para o campo magnético crítico $h_c = 1$, focamos apenas nas entropias de Rényi do estado funda-

⁴Lembrando que analisamos apenas o quadrante $\gamma, h \geq 0$.

⁵Conforme exposto no Apêndice A.II, a entropia de Rényi pode ser calculada neste caso através do método da matriz de correlação.

mental, foram verificadas as previsões para o comportamento dominante e subdominante desta, governados pela carga central e por um novo expoente (dimensão de escala do operador energia [74]), respectivamente. Por outro lado, para o modelo XX, além de uma análoga discussão da entropia do estado fundamental, fizemos também uma vasta análise das entropias de Rényi de estados excitados, tanto dos estados compactos, quanto dos não-compactos. Foi encontrado que para os estados ditos compactos, a entropia de Rényi do estado excitado é degenerada com a do estado fundamental, exceto por oscilações não usuais, em conformidade com a Refs. [28, 29]. Quanto aos estados excitados não-compactos, a entropia destes apresenta um excesso em relação à do estado fundamental, e ainda este excesso, que não desaparece no limite termodinâmico, está estreitamente relacionado com a excitação analisada, estes resultados também estão em acordo com as recentes previsões feitas pelos autores das Refs [28, 29].⁶

Com o objetivo de estudar sistemas exatamente integráveis na geometria de “escadas”, considerou-se no Capítulo 4 uma escada *zig-zag* de duas pernas com interação de três-*spins*. O tipo especial/específico da interação *multispin* que consideramos assegura a solubilidade do modelo via uma transformação de Jordan-Wigner. O diagrama de fases deste modelo foi determinado, foram encontradas regiões críticas e não críticas. No caso das regiões críticas, fomos capazes de obter analiticamente as correções de tamanho finito das energias, e através destas, conseguimos obter de modo exato a carga central e as dimensões escalares. O modelo investigado [Eq. (4.0.1)] está na mesma classe de universalidade de comportamento crítico do modelo XX, com carga central $c = 1$. Além disso, as dimensões escalares do modelo apresentam uma estrutura similar à do modelo XX [compare as Eqs. (4.1.12) e (4.1.13) com a Eq. (2.2.12)].

Novamente, a carga central foi também obtida através da análise das correções de tamanho finito da entropia de Rényi do estado fundamental. Na região do diagrama de fases na qual existe um modo de *gap*-nulo obtivemos $c = 1$. Enquanto que na região com dois modos de *gap*-nulo encontramos que o comportamento assintótico da entropia de Rényi é dado pela Eq. (4.2.3), com $c_{\text{eff}} = 2c = 2$. Lembrando que, diferentemente da correção de energia do estado fundamental [ver Eq. (4.1.10)], a previsão universal para a entropia de Rényi [Eq. (1.4.4)] não depende das velocidades do som, é de se esperar que cada modo de *gap*-nulo contribua para a correção de tamanho finito da entropia como na Eq. (1.4.4), e por isso obtivemos $c_{\text{eff}} = 2c$. De um modo geral, esperamos que $c_{\text{eff}} = n_{\text{gnulo}}c$, sendo n_{gnulo} o número de modos de *gap*-nulo. Foi feito também um vasto estudo da correção subdominante das entropias de Rényi. Na região do diagrama de fase com um modo de *gap*-nulo, o comportamento da entropia de Rényi S_n é semelhante ao observado no modelo XX, em contrapartida, na região na qual existem dois modos de *gap*-nulo foram observadas oscilações na entropia de von Neumann ($n = 1$). Entretanto,

⁶Contudo, o coeficiente $d^{\mathcal{F}}$, que aparece na Eq. (1.4.8), foi interpretado por nós de maneira distinta da proposta de Alcaraz *et al.* [28, 29].

em sistemas com condições de contorno periódicas, essas oscilações ainda não haviam sido observadas para índice $n = 1$ [72–76, 78]. E ainda, apesar da hamiltoniana (4.0.1) ser descrita por duas teorias conformes *não interagentes*, como indicado pela sua forma diagonal, Eq. (4.1.4), as oscilações (região com modos de *gap*-nulo) na entropia de Rényi não são apenas a soma das oscilações individuais de cada, e sim, uma forma mais abrangente [veja Eq. (4.2.6)]. Por fim, analisamos a entropia de Rényi de diversos estados excitados. Nossos resultados associados com excitações compactas, bem como com excitações não-compactas concordam com aqueles obtidos pelos autores das Refs. [28, 29], com excessão à interpretação do coeficiente $d^{\mathcal{R}}$, que foi feita de um modo diferente [30].

Ainda em relação ao modelo em geometria de escada de duas-pernas, uma extensão do mesmo para escadas de N -pernas com interações de $(N + 1)$ *spins* pode ser feita e levaria a uma carga central efetiva $c_{\text{eff}} = N$ (pelo menos para algumas regiões do espaço de parâmetros), isto porque para sistemas com n_{gnulo} modos de *gap*-nulo, é esperado que $c_{\text{eff}} = n_{\text{gnulo}}c$, pelo menos para sistemas não interagentes (veja também a Ref. [101] para uma discussão similar). Este resultado mostra que a entropia de von Neumann de uma escada de spins de N -pernas de tamanho L e L modos de *gap*-nulo deve se comportar como $S_1 \sim L \log(L) + aL$, este simples argumento mostra que a Lei Entrópica da Área pode ser violada em sistemas críticos bidimensionais. De fato, violações da Lei da Área já foram observadas em dimensões maiores que um [56–63].

Outro tema que merece nossa atenção é concernente aos chamados *quenches* quânticos, uma vez que, em anos recentes, estes têm despertado interesses tanto teóricos [66, 68, 79–81, 109–112], quanto experimentais [113–115]. De um modo geral o protocolo *quench* é o seguinte: o sistema é inicialmente descrito por uma hamiltoniana H_0 , e para instantes $t < 0$ o estado do sistema $|\Psi_0\rangle$ é o estado fundamental de H_0 . No instante $t = 0$ o sistema é abruptamente alterado, ou melhor, a hamiltoniana que descreve o sistema é instantaneamente alterada para H . Se $|\Psi_0\rangle$ não é um autoestado de H , deveremos, para $t > 0$, considerar a evolução temporal unitária do sistema. De modo que o estado do sistema evolui como $|\Psi(t)\rangle = e^{-Ht} |\Psi_0\rangle$. Basicamente, existem dois tipos de *quench*:

(i) *quenches* globais, que podem ser feitos mudando a interação entre os graus de liberdade em todo o sistema, e.g., preparar um sistema homogêneo e então dimerizar suas interações [68, 109, 110]. Estes também podem ser realizados através da alteração de algum parâmetro externo, e.g., o campo magnético. Vale salientar que existem realizações experimentais deste último protocolo [112–115];

(ii) *quenches* locais, no qual o sistema é alterado localmente, um exemplo são os *quenches* “corta-cola”, no qual apenas uma interação (i.e., um parâmetro local) é removida/acrescentada [68, 109–111].

Fisicamente, após um *quench* quântico, um dos aspectos mais interessantes da evolução do

emaranhamento do sistema é relativo a universalidade [23, 66, 116, 117]. Em geral, para um sistemas unidimensionais invariantes conforme, o comportamento da entropia de emaranhamento, entre duas metades da cadeia ($\ell = L/2$) no limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$), é:

- (i) $S(t) \sim \log v_s t$ para *quenches* locais;
- (ii) $S(t) \sim v_s t$ *quenches* globais.

Vale a pena comentarmos ainda que desenvolver experimentos reais para a medida do emaranhamento é uma tarefa extremamente difícil, principalmente em sistemas de muitos corpos, visto que o emaranhamento é uma quantidade extremamente *não local*. Para alguns *sistemas específicos*, a entropia de emaranhamento está conectada diretamente com observáveis, em princípio, acessíveis, e que incluem um pequeno número de graus de liberdade, de modo que o emaranhamento poderia ser inferido indiretamente através de tais medidas de mais fácil acesso. Este é exatamente o caso discutido nesta dissertação, conforme mostrado no Apêndice A.II, a entropia de Rényi pode ser *recuperada* através das correlações $G_{n,m} = \langle (c_n^\dagger - c_n) (c_m + c_m^\dagger) \rangle$, de acordo com as Eqs. (A.II.6) e (A.II.7). Por outro lado, para sistemas mais gerais, ainda não está claro como “medir” o emaranhamento estático e/ou dinâmico.⁷

Conforme comentamos na Seção 1.4, Klich e Levitov propuseram um método para calcular o comportamento (temporal) do emaranhamento após um *quench* quântico monitorando a flutuação do número de elétrons passando através do contato onde o *quench* foi feito. Entretanto, os resultados destes autores são específicos à sistemas de férmions não interagentes, e sua generalidade é uma questão aberta [81]. E ainda, tem sido questionado que estas flutuações são em muitos casos similares à evolução temporal do emaranhamento, mas não são equivalentes [66, 81].⁸ Juntamente com estas controvérsias, novos e diferentes protocolos *quench* têm sido propostos/formulados com o objetivo de encontrar um medida acessível do emaranhamento em sistemas unidimensionais [80, 81].

Tendo em vista os muitos esforços que têm sido feitos nesta crescente área, seria interessante obter a evolução temporal da emaranhamento de Rényi após um *quench* para os sistemas estudados nesta dissertação. Este trabalho está em progresso e será apresentado em outra oportunidade.

⁷Note que, o emaranhamento estático, que foi extensivamente discutido neste texto, é uma medida da correlação entre duas partes de um sistema em equilíbrio. Por outro lado, o emaranhamento dinâmico refere-se a evolução temporal do emaranhamento após o sistema ter sido perturbado.

⁸Mais recentemente, Song *et al.* [118] mostraram que, pelo menos para sistemas de férmions não interagentes, estas são, de fato, equivalentes.

Apêndice A

Hamiltoniana biquadrática

Considere a seguinte hamiltoniana definida em uma cadeia unidimensional de comprimento L :

$$H = \sum_{m,n} \left[A_{m,n} c_m^\dagger c_n + \frac{1}{2} (B_{m,n} c_m^\dagger c_n^\dagger + \text{h.c.}) \right], \quad (\text{A.0.1})$$

onde $c_m^\dagger$'s e c_m 's são operadores fermiônicos de criação e aniquilação, obedecendo a álgebra fermiônica (2.1.2). Esta é a forma biquadrática mais geral possível para uma hamiltoniana em termos de operadores fermiônicos definida em uma rede.

Este apêndice está dividido em duas seções. Na próxima seção, seguiremos os passos empregados por Lieb e colaboradores no famoso *Annals of Physics* deles [12]. Uma vez que desejamos diagonalizar a hamiltoniana (A.0.1), de modo exato, o método padrão é utilizarmos transformações unitárias, como a bem conhecida transformação de Bogoliubov. Por fim na segunda seção mostraremos como a entropia de Rényi pode ser obtida através do método das matrizes de correlação partícula-partícula. Neste caso seguiremos basicamente as rotas usadas por Peschel [119–122] que relacionou os autovalores da matriz de densidade reduzida com os autovalores de uma matriz de correlação (veja também [119]).

A.I Diagonalização exata

Nosso objetivo aqui é reescrever a equação (A.0.1) em uma forma diagonal, de modo que propomos:

$$H = \sum_k \Lambda_k \eta_k^\dagger \eta_k + \text{constante}, \quad (\text{A.I.1})$$

sendo η_k um novo conjunto de operadores a ser determinado e Λ_k é uma energia da hamiltoniana.

Consideraremos aqui A e B reais, então para H ser um operador hermitiano A deve ser uma matriz simétrica, $A_{m,n} = A_{n,m}$, e B deve ser antissimétrica, $B_{m,n} = -B_{n,m}$.

Primeiramente, impomos que estes novos operadores seguem uma simples combinação linear dos operadores $c_m^\dagger$'s e c_m 's

$$\eta_k = \sum_n \left[\frac{\phi_k(n) + \psi_k(n)}{2} c_n + \frac{\phi_k(n) - \psi_k(n)}{2} c_n^\dagger \right]. \quad (\text{A.I.2})$$

Estas transformações são conhecidas como transformações de Bogoliubov, cuja transformação inversa é

$$c_n = \sum_k \left[\frac{\phi_k^*(n) + \psi_k^*(n)}{2} \eta_k + \frac{\phi_k(n) - \psi_k(n)}{2} \eta_k^\dagger \right]. \quad (\text{A.I.3})$$

Agora obrigamos que essa transformação seja canônica, i.e., preserve a álgebra fermiônica do conjunto de operadores $\{c_m\}$ [veja Eq. (2.1.2)]

$$\begin{aligned} \{\eta_k, \eta_q\} &= 0 = \frac{1}{2} \sum_n [\phi_k(n) \phi_q(n) - \psi_k(n) \psi_q(n)], \\ \{\eta_k^\dagger, \eta_q\} &= \delta_{k,q} = \frac{1}{2} \sum_n [\phi_k^*(n) \phi_q(n) + \psi_k^*(n) \psi_q(n)]. \end{aligned} \quad (\text{A.I.4})$$

Retornando à hipótese de H ser diagonal na base do conjunto $\{\eta_k\}$, é fácil ver que isto implica em $[\eta_k, H] - \Lambda_k \eta_k = 0$. Substituindo então η_k [Eq. (A.I.2)] nesta última e igualando os coeficientes de cada operador a zero encontra-se:

$$\Lambda_k \phi_k(m) = \sum_n \psi_k(n) (A_{n,m} + B_{n,m}), \quad (\text{A.I.5})$$

$$\Lambda_k \psi_k(m) = \sum_n \phi_k(n) (A_{n,m} - B_{n,m}). \quad (\text{A.I.6})$$

Devemos encontrar também a constante presente na Eq. (A.I.1), esta pode ser determinada através da invariância do traço de H nas Eq. (A.0.1) e (A.I.1), resultando em

$$H = \sum_k \Lambda_k \left(\eta_k^\dagger \eta_k - \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sum_m A_{m,m}. \quad (\text{A.I.7})$$

Finalmente, é conveniente desacoplarmos as Eqs. (A.I.5) e (A.I.6), substituindo (A.I.5) em (A.I.6) e vice-versa obtemos:

$$\begin{aligned} \Phi_k(A - B)(A + B) &= \Lambda_k^2 \Phi_k \\ \Psi_k(A + B)(A - B) &= \Lambda_k^2 \Psi_k, \end{aligned} \quad (\text{A.I.8})$$

onde definimos o vetor $(\Phi_k)_m = \phi_k(m)$ e $(\Psi_k)_m = \psi_k(m)$. E a determinação do espectro da hamiltoniana (A.0.1) é reduzido a resolver as autoequações acima.

A.II Correlação e emaranhamento

Nesta seção consideramos que a cadeia de tamanho L definida pela hamiltoniana (A.0.1) foi dividida em dois subsistemas de tamanhos ℓ e $L - \ell$, $\ell = 1, 2, \dots, L - 1$. Como enfatizado no Capítulo 1, toda e qualquer propriedade (valor esperado de um operador) do subsistema com ℓ sítios pode ser obtida através da matriz de densidade reduzida ρ_ℓ , e analogamente para o outro subsistema. É possível obter ρ_ℓ calculando $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ e depois somando sobre todos os graus de liberdade em $L - \ell$ [veja Eq. (1.3.4)]. Entretanto este cálculo é impraticável se $\ell, L \gg 1$. Uma ilustração desse método direto, para o caso de dois osciladores harmônicos acoplados, pode ser encontrada nas Refs. [69, 123]. Nosso objetivo aqui é encontrar a relação exata entre os autovalores de ρ_ℓ e $G^\dagger G$, sendo $G_{n,m} = \langle (c_n^\dagger - c_n)(c_m + c_m^\dagger) \rangle$ [120–122]. Na Ref. [124] este procedimento é detalhadamente explicado para o caso do modelo XX, sendo assim um ótimo texto introdutório.

Conforme Eq. (1.3.6), podemos escrever sempre $\rho_\ell = e^{-\mathcal{H}_\ell}/Z$, onde lembramos que a hamiltoniana de emaranhamento $\mathcal{H}_\ell$ não é, em geral, a hamiltoniana que descreve o subsistema de comprimento ℓ . Entretanto, é garantido pelo teorema de Wick que $\mathcal{H}_\ell$ é também uma hamiltoniana biquadrática [119, 120] (veja também [108]). Portanto devemos ter

$$\mathcal{H}_\ell = \sum_{m,n=1}^{\ell} \left[\alpha_{m,n} c_m^\dagger c_n + \frac{1}{2} (\beta_{m,n} c_m^\dagger c_n^\dagger + \text{h.c.}) \right]. \quad (\text{A.II.1})$$

mas uma vez que impomos que $\rho_\ell = e^{-\mathcal{H}_\ell}/Z$ seja a matriz de densidade reduzida do subsistema com ℓ sítios, os autoestados de ρ_ℓ devem descrever este subsistema. Assim o problema a ser abordado agora é: *Quais são as matrizes α e β tal que $e^{-\mathcal{H}_\ell}/Z$ reproduza todos os valores médios corretamente?*

Por ter a mesma forma de H , podemos diagonalizar $\mathcal{H}_\ell$ através do mesmo procedimento já discutido, a transformação de Bogoliubov (A.I.2), de modo que podemos escrever:

$$\rho_\ell \propto e^{-\mathcal{H}_\ell} \propto \exp \left(- \sum_q \epsilon_q d_q^\dagger d_q \right), \quad (\text{A.II.2})$$

sendo $d_q^\dagger$ e d_q os operadores fermiônicos de criação e aniquilação de um única partícula com autoenergia ϵ_q . Assegurando que $\text{Tr}(\rho_\ell) = 1$, encontramos

$$\rho_\ell = \prod_q \frac{\exp(-\epsilon_q d_q^\dagger d_q)}{1 + \exp(-\epsilon_q)} = \bigotimes_q \varrho_q, \quad (\text{A.II.3})$$

Da qual vemos explicitamente que a matriz de densidade reduzida é *não correlacionada* na base de d_q . Definindo $\tanh(\epsilon_q/2) = \nu_q \rightarrow \epsilon_q = \log \left(\frac{1+\nu_q}{1-\nu_q} \right)$, a matriz de densidade correspondente ao q -ésimo modo fermiônico é $\varrho_q = \frac{1+\nu_q}{2} \exp \left[\log \left(\frac{1-\nu_q}{1+\nu_q} \right) d_q^\dagger d_q \right]$, E utilizando a relação

$e^{\log(\lambda_q d_q^\dagger d_q)} = \mathbb{1} + (\lambda_q - 1) d_q^\dagger d_q$ temos

$$\rho_\ell = \bigotimes_q \left(\frac{1 + \nu_q}{2} \mathbb{1} - \nu_q d_q^\dagger d_q \right). \quad (\text{A.II.4})$$

Da qual facilmente podemos calcular os seguintes valores médios:

$$\langle d_q^\dagger d_{q'} \rangle = \frac{1 + \nu_q}{2} \delta_{q,q'} \text{ e } \langle d_q d_{q'} \rangle = 0, \quad (\text{A.II.5})$$

que são úteis no cálculo da correlação $G_{n,m} = \langle (c_n^\dagger - c_n) (c_m + c_m^\dagger) \rangle$. Definindo $(\Theta_k)_m = \theta_k(m)$ como as autofunções ortonormais de $(\alpha - \beta)(\alpha + \beta)$, do mesmo modo que fizemos na Eq. (A.I.8), obtemos

$$(G^\dagger G)_{m,n} = \sum_q \nu_q^2 \theta_q^*(m) \theta_q(n) \quad \text{para } m, n = 1, 2, \dots, \ell. \quad (\text{A.II.6})$$

Note que a equação acima pode ser reescrita como $\Theta_q G^\dagger G = \tanh^2(\epsilon_q/2) \Theta_q$, que portanto define tanto Θ_q , bem como ϵ_q . Estes, por sua vez, definem α e β , que fornecem a hamiltoniana $\mathcal{H}_\ell$ tal que $\rho_\ell \propto e^{-\mathcal{H}_\ell}$.

Deste modo, o nosso problema está resolvido: através das correlações corretas $G_{n,m}$, advindas da hamiltoniana H [Eq. (A.0.1)], constrói-se $G^\dagger G$. E dos ℓ autovalores ν_q^2 de $G^\dagger G$ obtemos os 2^ℓ autovalores $\lambda^{\{\nu_{q_1}, \dots, \nu_{q_\ell}\}}$ da matriz de densidade reduzida

$$\frac{1 + \nu_{k_\ell}}{2} \lambda^{\{\nu_{q_1}, \dots, \nu_{q_{\ell-1}}\}} \text{ e } \frac{1 - \nu_{k_\ell}}{2} \lambda^{\{\nu_{q_1}, \dots, \nu_{q_{\ell-1}}\}},$$

finalmente destes autovalores podemos calcular as entropias de Rényi.

Em particular, observe que $\text{Tr}(\rho_\ell^n) = \prod_q \left[\left(\frac{1 + \nu_q}{2} \right)^n + \left(\frac{1 - \nu_q}{2} \right)^n \right]$, que imediatamente leva a

$$S_n(L, \ell) = \frac{1}{1-n} \log \text{Tr}(\rho_\ell^n) = \frac{1}{1-n} \sum_{i=1}^{\ell} \log \left[\left(\frac{1 + \nu_{q_i}}{2} \right)^n + \left(\frac{1 - \nu_{q_i}}{2} \right)^n \right]. \quad (\text{A.II.7})$$

E a entropia de von Neumann $\lim_{n \rightarrow 1} S_n(L, \ell)$ é

$$S_1(L, \ell) = - \sum_{i=1}^{\ell} \left[\left(\frac{1 + \nu_{q_i}}{2} \right) \log \left(\frac{1 + \nu_{q_i}}{2} \right) + \left(\frac{1 - \nu_{q_i}}{2} \right) \log \left(\frac{1 - \nu_{q_i}}{2} \right) \right],$$

Veja que se substituirmos $\nu_q = \tanh(\epsilon_q/2)$ obtemos

$$S_1(L, \ell) = \sum_k \left[\log(e^{-\epsilon_k} + 1) + \frac{\epsilon_k}{e^{\epsilon_k} + 1} \right] = -\log(Z) + \text{Tr}(\rho_\ell \mathcal{H}_\ell),$$

ou seja, devido à forma de $\mathcal{H}_\ell$ [Eq. (A.II.2)], têm-se as mesmas expressões para a entropia de von Neumann e termodinâmica $\mathcal{S} = F + \langle \mathcal{H}_\ell \rangle$.

Nos Capítulos 3 e 4, os procedimentos discutidos aqui, estão aplicados para a cadeia XY e para uma escada de duas pernas com interação de três *spins*, respectivamente. Além das referências padrões já citadas no início deste apêndice, pode-se encontrar uma excelente coletânea do método da correlação utilizado aqui nas Ref. [68, 69].

Bibliografia

- [1] E. Ising, *Beitrag zur theorie des ferromagnetismus*, *Zeitschrift für Physika* **31**, 253 (1925).
- [2] D. Eloy, F. B. Ramos, *Magnetic properties in an alternating-spin ferromagnetic Ising chain*, *J. Magn. Magn. Mater.* **77**, 1934 (2011).
- [3] L. Onsager, *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
- [4] B. Kaufman, *Crystal statistics. II. Partition function evaluated by spinor analysis*, *Phys. Rev.* **76**, 1232 (1949).
- [5] A. Auerbach, *Interacting electrons and quantum magnetism*, Graduate Texts in Contemporary Physics, Springer-Verlag, Berlin (1994).
- [6] A. Moreo, S. Yunoki, E. Dagotto, *Phase separation scenario for manganese oxides and related materials*, *Science* **283**, 203 (1999).
- [7] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas, *Giant magnetoresistance of (001)fe/(001)cr magnetic superlattices*, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
- [8] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, W. Zinn, *Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange*, *Phys. Rev. B* **39**, 4828 (1989).
- [9] E. Dagotto, T. M. Rice, *Surprises on the way from 1d to 2d quantum magnets: The novel ladder materials*, *Science* **271**, 618 (1996). E suas referências.
- [10] P. Jordan, E. Wigner, *Über das paulische äquivalenzverbot*, *Zeitschrift für Physik* **47**, 631 (1928).
- [11] H. Bethe, *Zur theorie der metalle. I. Eigenwerte und eigenfunktionen der linearen atomkette*, *Zeitschrift für Physika* **71**, 205 (1931).

- [12] E. H. Lieb, T. Schultz, D. J. Mattis, *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*, *Ann. Phys. (N.Y.)* **16**, 3, 407 (1961).
- [13] E. H. Lieb, W. Liniger, *Exact analysis of an interacting bose gas. I. The general solution and the ground state*, *Phys. Rev.* **130**, 1605 (1963).
- [14] E. H. Lieb, W. Liniger, *Exact analysis of an interacting bose gas. II. The excitation spectrum*, *Phys. Rev.* **130**, 1616 (1963).
- [15] E. H. Lieb, F. Y. Wu, *Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension*, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968).
- [16] E. H. Lieb, F. Y. Wu, *Errata: Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension*, *Phys. Rev. Lett.* **21**, 192 (1968).
- [17] B. Sutherland, *Beautiful models: 70 years of exactly solved quantum many-body problems*, World Scientific Publishing, Singapura (2004).
- [18] A. A. Belavin, A. M. Polyakov, A. B. Zamolodchikov, *Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory*, *Nucl. Phys. B* **241**, 333 (1984).
- [19] T. R. de Oliveira, G. Rigolin, M. C. de Oliveira, E. Miranda, *Multipartite entanglement signature of quantum phase transitions*, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 170401 (2006).
- [20] J. C. Xavier, F. C. Alcaraz, *Precise determination of quantum critical points by the violation of the entropic area law*, *Phys. Rev. B* **84**, 094410 (2011).
- [21] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, A. Kitaev, *Entanglement in quantum critical phenomena*, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).
- [22] A. Amico, R. Fazio, Osterloh, V. Vedral, *Entanglement in many-body systems*, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).
- [23] V. E. Korepin, *Universality of entropy scaling in one dimensional gapless models*, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 096402 (2004).
- [24] P. Calabrese, J. Cardy, *Entanglement entropy and quantum field theory*, *J. Stat. Mech.* P06002 (2004).
- [25] F. C. Alcaraz, M. S. Sarandy, *Finite-size corrections to entanglement in quantum critical systems*, *Phys. Rev. A* **78**, 032319 (2008).
- [26] R. P. Feynman, *Simulating physics with computers*, *Int. J. Theor. Phys.* **21**, 467 (1982).

- [27] J. Eisert, M. Cramer, M. B. Plenio, *Colloquium: Area laws for the entanglement entropy*, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 277 (2010). E suas referências.
- [28] F. C. Alcaraz, M. I. Berganza, G. Sierra, *Entanglement of low-energy excitations in conformal field theory*, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 201601 (2011).
- [29] M. I. Berganza, F. C. Alcaraz, G. Sierra, *Entanglement of excited states in critical spin chains*, *J. Stat. Mech.* P01016 (2012).
- [30] D. Eloy, J. C. Xavier, *Entanglement entropy of the low-lying excited states and critical properties of an exactly solvable two-leg spin ladder with three-spin interactions*, *Phys. Rev. B* **86**, 064421 (2012).
- [31] S.-k. Ma, *Modern theory of critical phenomena*, Westview Press, Nova York (1976).
- [32] J. Cardy, *Scaling and renormalization in statistical physics*, Cambridge University Press, Cambridge (1994).
- [33] H. E. Stanley, *Introduction to phase transitions and critical phenomena*, Oxford University Press, Londres (1971).
- [34] M. E. Fisher, *The renormalization group in the theory of critical behavior*, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 597 (1974).
- [35] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*, Editora Academic, Nova York (1982).
- [36] P. DiFrancesco, P. Mathieu, D. Senechal, *Conformal field theory*, Springer, Nova York (1997).
- [37] J. M. Yeomans, *Statistical mechanics of phase transitions*, Oxford Science Publications, Nova York (1992).
- [38] G. Mussardo, *Statistical field theory: An introduction to exactly solved models in statistical physics*, Oxford Graduate Texts, Nova York (2010).
- [39] J. B. Kogut, *An introduction to lattice gauge theory and spin systems*, *Rev. Mod. Phys.* **51**, 659 (1979).
- [40] I. Affleck, *Universal term in the free energy at a critical point and the conformal anomaly*, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 746 (1986).

- [41] H. W. J. Blöte, J. L. Cardy, M. P. Nightingale, *Conformal invariance, the central charge, and universal finite-size amplitudes at criticality*, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 742 (1986).
- [42] J. Cardy, *Operator content of two-dimensional conformally invariant theories*, *Nucl. Phys. B* **270**, 186 (1986).
- [43] J. Voit, *One-dimensional Fermi liquids*, *Rep. Prog. Phys.* **58**, 9, 977 (1995).
- [44] P. Christe, M. Henkel, *Introduction to conformal invariance and its applications to critical phenomena*, *Lecture Notes in Physics Monographs*, Springer **16** (1993).
- [45] F. C. Alcaraz, M. N. Barber, M. T. Batchelor, *Conformal invariance, the XXZ chain and the operator content of two-dimensional critical systems*, *Ann. Phys. (N.Y.)* **182**, 280 (1988).
- [46] L. P. Kadanoff, *Correlation functions on the critical lines of the Baxter and Ashkin-Teller models*, *Ann. Phys. (N.Y.)* **120**, 39 (1979).
- [47] L. P. Kadanoff, A. C. Brown, *Multicritical behavior at the kosterlitz-thouless critical point*, *Ann. Phys. (N.Y.)* **121**, 318 (1979).
- [48] E. Schrödinger, *Die gegenwärtige situation in der quantenmechanik*, *Die Naturwissenschaften* **23**, 807; 823; 844 (1935).
- [49] D. C. Lay, *Linear algebra and its applications*, 3^a Edição, Addison-Wesley, Reading/MA (2003).
- [50] G. Stewart, *On the early history of the singular value decomposition*, *SIAM Review* **35:1**, 551 (1992).
- [51] E. Schmidt, *Zur theorie der linearen und nichtlinearen integralgleichungen*, *Math. Annalen* **63**, 433 (1907).
- [52] R. P. Feynman, *Statistical mechanics: A set of lectures*, Westview Press (1972).
- [53] M. Nielsen, I. Chuang, *Quantum computation and quantum information*, Cambridge University Press (2000).
- [54] M. Srednicki, *Entropy and area*, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 666 (1993).
- [55] M. M. Wolf, F. Verstraete, M. B. Hastings, J. I. Cirac, *Area laws in quantum systems: Mutual information and correlations*, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 070502 (2008).

- [56] M. M. Wolf, *Violation of the entropic area law for fermions*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 010404 (2006).
- [57] W. Li, L. Ding, R. Yu, T. Roscilde, S. Haas, *Scaling behavior of entanglement in two- and three-dimensional free-fermion systems*, *Phys. Rev. B* **74**, 073103 (2006).
- [58] D. Gioev, I. Klich, *Entanglement entropy of fermions in any dimension and the widom conjecture*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 100503 (2006).
- [59] M. Cramer, J. Eisert, M. B. Plenio, *Statistics dependence of the entanglement entropy*, *Phys. Rev. Lett.* **220603** (2007).
- [60] L. Ding, N. Bray-Ali, R. Yu, S. Haas, *Subarea law of entanglement in nodal fermionic systems*, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 215701 (2008).
- [61] T. Barthel, M.-C. Chung, U. Schollwöck, *Entanglement scaling in critical two-dimensional fermionic and bosonic systems*, *Phys. Rev. A* **74**, 022329 (2006).
- [62] B. Swingle, *Entanglement entropy and the Fermi surface*, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 050502 (2010).
- [63] W. Ding, A. Seidel, K. Yang, *Entanglement entropy of Fermi liquids via multidimensional bosonization*, *Phys. Rev. X* **2**, 011012 (2012).
- [64] C. Holzhey, F. Larsen, F. Wilczek, *Geometric and renormalized entropy in conformal field theory*, *Nucl. Phys. B* **424**, 443 (1994).
- [65] J. I. Latorre, E. Rico, G. Vidal, *Ground state entanglement in quantum spin chains*, *Quantum Inf. Comput.* **4**, 48 (2004).
- [66] P. Calabrese, J. Cardy, *Entanglement entropy and conformal field theory*, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504005 (2009).
- [67] I. Affleck, A. W. W. Ludwig, *Universal noninteger ground-state degeneracy in critical quantum systems*, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 161 (1991).
- [68] I. Peschel, V. Eisler, *Reduced density matrices and entanglement entropy in free lattice models*, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504003 (2009).
- [69] I. Peschel, *Special review: Entanglement in solvable many-particle models*, *Braz. J. Phys.* **42**, 267 (2012).

- [70] N. Laflorencie, E. S. Sørensen, M. S. Chang, I. Affleck, *Boundary effects in the critical scaling of entanglement entropy in 1d systems*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 100603 (2006).
- [71] J. C. Xavier, *Entanglement entropy, conformal invariance, and the critical behavior of the anisotropic spin- s Heisenberg chains: DMRG study*, *Phys. Rev. B* **81**, 224404 (2010).
- [72] P. Calabrese, M. Campostrini, F. Essler, B. Nienhuis, *Parity effects in the scaling of block entanglement in gapless spin chains*, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 095701 (2010).
- [73] P. Calabrese, F. H. L. Essler, *Universal corrections to scaling for block entanglement in spin-1/2 XX chains*, *J. Stat. Mech.* P08029 (2010).
- [74] J. C. Xavier, F. C. Alcaraz, *Finite-size corrections of the entanglement entropy of critical quantum chains*, *Phys. Rev. B* **85**, 024418 (2012).
- [75] M. Fagotti, P. Calabrese, *Universal parity effects in the entanglement entropy of XX chains with open boundary*, *J. Stat. Mech.* P01017 (2011).
- [76] M. Fagotti, P. Calabrese, J. E. Moore, *Entanglement spectrum of random-singlet quantum critical points*, *Phys. Rev. B* **83**, 045110 (2011).
- [77] J. Cardy, P. Calabrese, *Unusual corrections to scaling in entanglement entropy*, *J. Stat. Mech.* P04023 (2010).
- [78] B. Nienhuis, M. Campostrini, P. Calabrese, *Entanglement, combinatorics and finite-size effects in spin chains*, *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* P02063 (2009).
- [79] I. Klich, L. Levitov, *Quantum noise as an entanglement meter*, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 100502 (2009).
- [80] J. Cardy, *Measuring entanglement using quantum quenches*, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 150404 (2011).
- [81] B. Hsu, E. Grosfeld, E. Fradkin, *Quantum noise and entanglement generated by a local quantum quench*, *Phys. Rev. B* **80**, 235412 (2009).
- [82] P. Calabrese, M. Mintchev, E. Vicari, *The entanglement entropy of one-dimensional systems in continuous and homogenous space*, *J. Stat. Mech.* P09028 (2011).
- [83] L. Masanes, *Area law for the entropy of low-energy states*, *Phys. Rev. A* **80**, 052104 (2009).
- [84] P. Calabrese, M. I. Mintchev, E. Vicari, *Entanglement entropy of one-dimensional gases*, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 020601 (2011).

- [85] V. Alba, M. Fagotti, P. Calabrese, *Entanglement entropy of excited states*, *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* P10020 (2009).
- [86] E. Ercolessi, S. Evangelisti, F. Franchini, F. Ravanini, *Correlation length and unusual corrections to entanglement entropy*, *Phys. Rev. B* **85**, 115428 (2012).
- [87] M. Dalmonte, E. Ercolessi, L. Taddia, *Critical properties and Rényi entropies of the spin-3/2 XXZ chain*, *Phys. Rev. B* **85**, 165112 (2012).
- [88] E. Pasca, T. Roscilde, M. Evangelisti, E. Burzurí, F. Luis, L. J. de Jongh, S. Tanase, *Realization of the one-dimensional anisotropic XY model in a Tb(III)-W(V) chain compound*, *Phys. Rev. B* **85**, 184434 (2012).
- [89] S. Sachdev, *Quantum Phase Transition*, 2^a Edição, Springer, Nova York (2011).
- [90] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover, Nova York (1964).
- [91] B.-Q. Jin, V. E. Korepin, *Quantum spin chain, Toeplitz determinants and the Fisher-Hartwig conjecture*, *J. Stat. Phys.* **116**, 79 (2004).
- [92] G. Sierra, *Cumunicação privada* (2012).
- [93] M. Suzuki, *The dimer problem and the generalized X-model*, *Phys. Lett. A* **34**, 338 (1971).
- [94] A. M. Tsvelik, *Incommensurate phases of quantum one-dimensional magnetics*, *Phys. Rev. B* **42**, 779 (1990).
- [95] I. Titvinidze, G. I. Japaridze, *Spin-1/2 XX chain with three-site interactions: Spin-Peierls instability*, *Eur. Phys. J. B* **32**, 383 (2003).
- [96] P. Lou, W.-C. Wu, M.-C. Chang, *Quantum phase transition in spin-1/2 XX Heisenberg chain with three-spin interaction*, *Phys. Rev. B* **70**, 064405 (2004).
- [97] A. A. Zvyagin, *Quantum phase transitions in an exactly solvable quantum-spin biaxial model with multiple spin interactions*, *Phys. Rev. B* **80**, 014414 (2009).
- [98] V. Derzhko, O. Derzhko, J. Richter, *Exact solution of a spin-1/2 XX chain with three-site interactions in a random transverse field: Influence of randomness on the quantum phase transition*, *Phys. Rev. B* **83**, 174428 (2011).
- [99] X. Liu, M. Zhong, H. Xu, P. Tong, *Chiral phase and quantum phase transitions of anisotropic XY chains with three-site interactions*, *J. Stat. Mech.* P01003 (2012).

- [100] O. Derzhko, T. Krokhmalkskii, J. Stolze, T. Verkholyak, *Deformable spin- 1/2 XX chain with three-site interactions at zero and finite temperatures*, *Phys. Rev. B* **79**, 094410 (2009).
- [101] M. Fagotti, *New insights into the entanglement of disjoint blocks*, *Eur. Phys. Lett.* **97**, 17007 (2012).
- [102] J. K. Pachos, M. B. Plenio, *Three-spin interactions in optical lattices and criticality in cluster hamiltonians*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 056402 (2004).
- [103] A. G. Izergin, V. E. Korepin, N. Y. Reshetikhin, *Conformal dimensions in Bethe ansatz solvable models*, *J. Phys. A: Math Gen.* **22**, 2615 (1989).
- [104] F. Woynarovich, *Finite-size effects in a non-half-filled Hubbard chain*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **22**, 4243 (1989).
- [105] H. Frahm, V. Korepin, *Critical exponents for the one-dimensional Hubbard model*, *Phys. Rev. B* **42**, 10553 (1990).
- [106] F. H. Essler, *Threshold singularities in the one-dimensional Hubbard model*, *Phys. Rev. B* **81**, 205120 (2010).
- [107] M. J. Martins, *The thermodynamic limit and the finite-size behaviour of the fundamental $Sp(2N)$ spin chain*, *Nucl. Phys. B* **636**, 583 (2002).
- [108] M. Gaudin, *Une démonstration simplifiée du théorème de wick en mécanique statistique*, *Nuclear Physics* **15**, 89 (1960).
- [109] V. Eisler, I. Peschel, *Evolution of entanglement after a local quench*, *J. Stat. Mech.* P06005 (2007).
- [110] V. Eisler, I. Peschel, *Entanglement in a periodic quench*, *Ann. Phys.* **17**, 410 (2008).
- [111] J.-M. Stephan, J. Dubail, *Local quantum quenches in critical one-dimensional systems entanglement, the Loschmidt echo, and light-cone effects*, *J. Stat. Mech.* P08019 (2011).
- [112] P. Calabrese, F. H. L. Essler, M. Fagotti, *Quantum quench in the transverse field Ising chain: I. Time evolution of order parameter correlators*, *J. Stat. Mech.* P07016 (2012).
- [113] M. Greiner, O. Mandel, T. W. Hänsch, I. Bloch, *Collapse and revival of the matter wave field of a Bose-Einstein condensate*, *Nature* **419**, 51 (2002).

- [114] S. Trotzky, Y.-A. Chen, A. Flesch, I. P. McCulloch, U. Schollwöck, J. Eisert, Bloch, I., *Probing the relaxation towards equilibrium in an isolated strongly correlated 1d Bose gas*, *Nature Phys.* **8**, 325 (2012).
- [115] M. Cheneau, P. Barmettler, D. Poletti, M. Endres, P. Schauss, T. Fukuhara, C. Gross, I. Bloch, C. Kollath, S. Kuhr, *Light-cone-like spreading of correlations in a quantum many-body system*, *Nature* **481**, 484 (2012).
- [116] P. Calabrese, J. Cardy, *Entanglement and correlation functions following a local quench: a conformal field theory approach*, *J. Stat. Mech.* P10004 (2007).
- [117] S. Sotiriadis, J. Cardy, *Inhomogeneous quantum quenches*, *J. Stat. Mech.* P11003 (2008).
- [118] H. F. Song, S. Rachel, C. Flindt, I. Klich, N. Laflorencie, K. Le Hur, *Bipartite fluctuations as a probe of many-body entanglement*, *Phys. Rev. B* **85**, 035409 (2012).
- [119] M.-C. Chung, I. Peschel, *Density-matrix spectra of solvable fermionic systems*, *Phys. Rev. B* **64**, 064412 (2001).
- [120] I. Peschel, *Calculation of reduced density matrices from correlation functions*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 14, L205 (2003).
- [121] I. Peschel, *On the reduced density matrix for a chain of free electrons*, *J. Stat. Mech.* P06004 (2004).
- [122] I. Peschel, *Entanglement entropy with interface defects*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 4327 (2005).
- [123] I. Peschel, M.-C. Chung, *Density matrices for a chain of oscillators*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **32**, 8419 (1999).
- [124] J. I. Latorre, A. Riera, *A short review on entanglement in quantum spin systems*, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504002 (2009).