



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA

Flávia Braga Ramos

As escadas de Heisenberg de N pernas

Uberlândia

2013

Flávia Braga Ramos

As escadas de Heisenberg de N pernas

Dissertação apresentada ao Instituto
de Física da Universidade Federal de
Uberlândia para obtenção do título de
Mestre.

Orientador: José Cândido Xavier

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

INSTITUTO DE FÍSICA

Uberlândia

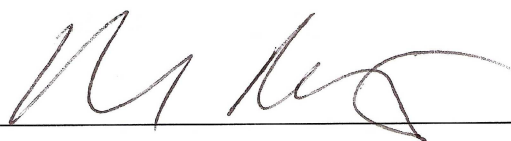
2013

BANCA EXAMINADORA



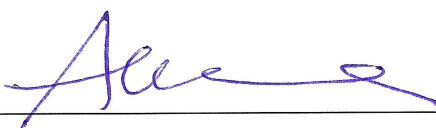
Prof. Dr. José Cândido Xavier - Orientador

Universidade Federal de Uberlândia - UFU



Prof. Dr. Raimundo Rocha dos Santos

Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ



Prof. Dr. Augusto Miguel Alcalde Milla

Universidade Federal de Uberlândia - UFU

*Dedico esta dissertação aos meus
pais pela compreensão, incentivo
e carinho.*

Agradecimentos

Aos meus pais que não mediram esforços para que eu chegasse até esta etapa de minha vida.

Meu sincero agradecimento ao José Cândido Xavier, meu orientador, que desde o primeiro momento depositou grande confiança em mim e acreditou em minha capacidade. Muitas vezes dispondo de seu tempo livre para empenhar seu esforço em me orientar, em disponibilizar conhecimento, em caminhar ao meu lado com este trabalho. Agradeço também por sua amizade e paciência.

À todos os professores do Instituto de Física que foram a peça chave para minha formação acadêmica.

Aos meus amigos pelo incentivo e apoio.

Ao Dalson, por sua ajuda, compreensão e amizade.

À todos aqueles que, diretamente ou indiretamente, contribuíram para este trabalho.

À FAPEMIG pelo suporte financeiro.

“Se eu vi mais longe, foi por estar de pé sobre ombros de gigantes.”

Isaac Newton

Resumo

Compostos como o pirofosfato de vanadil $(\text{VO}_2)\text{P}_2\text{O}_7$ e alguns sistemas de cupratos (exemplo: SrCu_2O_3 e $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$) são realizações experimentais das escadas de Heisenberg. Estes compostos são exemplos bem conhecidos de sistemas fortemente correlacionados. A física destes sistemas é descrita, corretamente, somente por métodos não perturbativos. Neste trabalho, nós investigamos as escadas de Heisenberg de N pernas com spin- S usando a técnica do grupo de renormalização da matriz de densidade (DMRG). Nós obtivemos estimativas da energia do estado fundamental por sítio, no limite termodinâmico (e_∞), assim como do gap de spin (Δ_S) de escadas com spin até $S = \frac{5}{2}$. Nós encontramos que para escadas de spin semi-inteiro o gap é nulo (finito) para N ímpar (par); enquanto que escadas de spin inteiro nossos resultados indicam um gap de spin finito, independente do número de pernas. Esses resultados estão em acordo com a conjectura de Haldane-Sierra [1–3]. Nós estimamos, também, o valor de e_∞ para o modelo de Heisenberg bidimensional com spin- S a partir das energias do estado fundamental, no limite termodinâmico, das escadas de Heisenberg.

Palavras-chave: Escadas de Heisenberg, técnicas numéricas, DMRG, gap de spin, energias.

Abstract

Compounds such as vanadyl pyrophosphate $(\text{VO}_2)\text{P}_2\text{O}_7$ and some cuprate systems (example: SrCu_2O_3 and $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$) are experimental realizations of the Heisenberg ladders. These compounds are well known examples of strongly correlated systems. The physics of these systems is described, correctly, only by non-perturbative methods. In this work, we investigate the spin- S N -leg Heisenberg ladders using the density matrix renormalization group (DMRG) technique. We obtain estimates of the ground state energy per site, in thermodynamic limit (e_∞), as well as of the spin gap (Δ_S) for the ladders with spin up to $S = \frac{5}{2}$. We found that for half-integer spin ladders the spin gap is zero (finite) for N odd (even); whereas for the integer spin ladders our results support a finite spin gap, independent of the number of legs. These results are in agreement with the Haldane-Sierra's conjecture [1–3]. We also estimate the value of e_∞ for the two-dimensional spin- S Heisenberg model from the ground state energies, in the thermodynamic limit, of the Heisenberg ladders.

Keywords: Heisenberg ladders, numerical techniques, DMRG, spin gap, energies.

Lista de Figuras

2.1	Estrutura cristalina do composto Sr_2CuO_3 . As cadeias Cu – O são paralelas ao eixo a[31]. O acoplamento J ao longo da cadeia é muito maior do que o acoplamento J_\perp entre as cadeias ($\frac{J_\perp}{J} \sim 10^{-5}$), de modo que as cadeias podem ser consideradas desacopladas, dando assim o “caráter unidimensional” ao composto [33].	6
2.2	Estrutura cristalina do composto $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$ (NENP) [38].	7
2.3	Estrutura do cristal $\text{MnCl}_3(\text{bipy})$ [42].	7
2.4	(a) Estrutura cristalina do composto Cr_7Cd [43]. (b) Estrutura molecular do composto $[(\text{C}_3\text{H}_7)_2\text{NH}_2][\text{Fe}_7\text{MnF}_8\{\text{O}_2\text{CC}(\text{CD}_3)_3\}_{16}]$. Esquema de cores: Fe, círculo em azul escuro; Mn, círculo em azul claro; F, círculo em verde; O círculo em vermelho; C, círculo em preto; N, círculo em amarelo. Os átomos de hidrogênio são omitidos na figura [44].	8
2.5	Representação esquemática das escadas de Heisenberg de N pernas com acoplamento J ao longo das cadeias e acoplamento J_\perp entre as cadeias.	9
2.6	Representação esquemática das escadas de duas (a) e três pernas (b). Os círculos preenchidos são os íons de Cu^{2+} e os íons de O^{2-} estão localizados nos vértices dos quadrados desenhados pelas linhas sólidas [27]. Os spins de Cu são fortemente acoplados uns com os outros via uma interação de supertroca uniforme dentro de cada escada, enquanto que as escadas são separadas umas das outras, uma vez que há uma fraca interação de supertroca devido as ligações Cu – O – Cu de 90° (veja texto).	10
2.7	Estrutura do composto de duas pernas $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ [7].	10

2.8	Resultados experimentais da susceptibilidade magnética $\chi(T)$ dos compostos com geometria de escadas (a) $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ [28], (b) SrCu_2O_3 e (c) $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ [27]. As linhas sólidas representam a susceptibilidade corrigida, depois de subtrair dos dados originais a componente de Curie para baixas temperaturas. A componente de Curie é atribuída à contribuição de uma porcentagem de íons livres que surgem devido às imperfeições da rede ou impurezas. Os dados corrigidos em (b) são perfeitamente fitados assumindo um gap de spin de $420K$ a partir da equação $\chi(T) \propto T^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{\Delta_S}{T}}$ [71].	11
2.9	Representação esquemática de uma escada de duas pernas no limite $J_\perp \gg J$. . .	12
2.10	Gap de spin das escadas de Heisenberg de n_c pernas, com spin- $\frac{1}{2}$, em função de $\frac{1}{L}$. Figura extraída da referência [73].	13
2.11	Susceptibilidade magnética da cadeia e das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ com até seis pernas obtidas por Frischmuth e colaboradores [74], usando a técnica de Monte Carlo. As duas figuras diferem do alcance de temperatura analisado. Podemos ver claramente em (b) a diferença qualitativa entre escadas com pernas pares e ímpares, como discutido no texto.	13
3.1	Representação esquemática de uma cadeia (superbloco). O superbloco é composto de duas partes: sistema e reservatório.	15
3.2	Representação esquemática do procedimento de crescimento de uma cadeia de tamanho $L = 4$ para uma cadeia com $L' = L + 2$. O bloco A (B) da cadeia de tamanho $L' = 6$ é exatamente o sistema (reservatório) da cadeia de tamanho $L = 4$	15
3.3	Representação esquemática do crescimento da cadeia de acordo com o algoritmo infinito.	19
3.4	Convergência da energia do estado fundamental por sítio da cadeia de Heisenberg, com $S = \frac{1}{2}$, em função da iteração. Foram considerados diferentes valores de m (veja legenda).	21
3.5	Representação esquemática da varredura, no algoritmo finito.	23
3.6	Diferença entre a energia do estado fundamental exata e a energia do estado fundamental calculada através do (a) RG e (b) DMRG para uma cadeia de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ e $L = 28$. A energia do estado fundamental exata foi calculada usando o método de Lanczos.	26
3.7	Representação esquemática de um sistema de tamanho 6×7 do ponto de vista do DMRG.	27
3.8	Representação esquemática do crescimento da cadeia para uma escada de (a) duas pernas e (b) três pernas.	27

3.9	Representação esquemática do processo de varredura do algoritmo de sistema finito para uma escada de Heisenberg de tamanho 3×4	28
4.1	e_∞ vs. $\frac{1}{N}$. Os símbolos são os dados numéricos reportados na tabela 4.1. A linha pontilhada é um ajuste destes dados com a equação (4.1). Os pontos que não estão conectados pela linha pontilhada não foram considerados no ajuste.	31
4.2	Δ_S vs. $\frac{1}{(L-1)}$ para as escadas de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas pontilhadas são os ajustes dos nossos dados com a equação (4.2).	31
4.3	e_∞ vs. $\frac{1}{N}$. Os símbolos são os dados numéricos reportados na tabela 4.3. A linha pontilhada é um ajuste deste dados com a equação (4.1). Os pontos que não estão conectados pela linha pontilhada não foram considerados no ajuste.	34
4.4	Gap de spin vs. $\frac{1}{(L-1)}$ da escada de Heisenberg de spin-1 com (a) duas pernas e (b) três pernas. Os pontos em vermelho (azul) é a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro (quarto) estado excitado. As linhas pontilhadas em ambos os gráficos são os ajustes dos nossos dados usando a equação (4.2). Podemos notar que para o caso de duas pernas o estado fundamental é não degenerado, enquanto que para a escada de três pernas o estado fundamental possui 4 degenerescências (veja texto).	35
4.5	Δ_S vs. $\frac{1}{(L-1)}$ para as escadas de Heisenberg de spin-1 com até três pernas. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas pontilhadas são os ajustes dos nossos dados com a equação (4.2).	36
4.6	e_∞ vs. $\frac{1}{N}$. Os símbolos são os dados numéricos reportados na tabela 4.5. A linha pontilhada é um ajuste destes dados com a equação (4.1). Os pontos que não estão conectados pela linha pontilhada não foram considerados no ajuste.	37
4.7	Δ_S vs. $\frac{1}{(L-1)}$ para as escadas de Heisenberg de spin- $\frac{3}{2}$. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas pontilhadas são os ajustes dos nossos dados com a equação (4.2).	38
4.8	e_∞ vs. $\frac{1}{N}$. Os símbolos são os dados numéricos reportados na tabela 4.7. A linha pontilhada é um ajuste destes dados com a equação (4.1). Os pontos que não estão conectados pela linha pontilhada não foram considerados no ajuste.	40
4.9	Δ_S vs. $\frac{1}{L-1}$ para as escadas de Heisenberg de spin-2. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas pontilhadas são os ajuste dos nossos dados com a equação (4.2). O gráfico inserido no gráfico principal é uma ampliação dos últimos pontos encontrados para a escada de Heisenberg de uma perna ($1 \times L$).	41

4.10	e_∞ vs. $\frac{1}{N}$. Os símbolos são os dados numéricos reportados na tabela 4.10. A linha pontilhada é um ajuste destes dados com a equação (4.1). Os pontos que não estão conectados pela linha pontilhada não foram considerados no ajuste. .	43
4.11	Δ_S vs. $\frac{1}{L-1}$ para as escadas de Heisenberg de spin- $\frac{5}{2}$ com até três pernas. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas pontilhadas são os ajustes dos nossos dados com a equação (4.2).	43

Lista de Tabelas

2.1	Exemplos de compostos que são realizações experimentais da cadeia de Heisenberg de spin- S	6
4.1	Estimativas da energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ com até seis pernas e do modelo de Heisenberg 2D. Valores obtidos por <i>ansatz</i> de Bethe [45] e MC [74, 96] também são apresentados (veja texto). . . .	30
4.2	Estimativas do gap de spin $\Delta_S^\infty(N)$ das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ com até seis pernas.	32
4.3	Estimativas da energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de spin-1 com até seis pernas e do modelo de Heisenberg 2D.	33
4.4	Estimativas do gap de spin $\Delta_S^\infty(N)$ das escadas de Heisenberg de spin-1 com até três pernas.	36
4.5	Estimativas da energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{3}{2}$ com até seis pernas e do modelo de Heisenberg 2D.	37
4.6	Estimativas do gap de spin $\Delta_S^\infty(N)$ das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{3}{2}$ com até cinco pernas.	38
4.7	Estimativas da energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de spin-2 com até seis pernas e do modelo de Heisenberg 2D.	39
4.8	Estimativas do gap de spin $\Delta_S^\infty(N)$ das escadas de Heisenberg de spin-2 com até três pernas.	41
4.9	Estimativas do gap de spin que são encontrados na literatura da cadeia de Heisenberg de spin-2.	42
4.10	Energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{5}{2}$ com até seis pernas e do modelo do Heisenberg 2D.	42
4.11	Estimativas do gap de spin $\Delta_S^\infty(N)$ das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{5}{2}$ com até três pernas.	43

Sumário

1	Introdução	1
2	As Escadas de Heisenberg de N pernas	4
3	Técnicas Numéricas	14
3.1	O Grupo de Renormalização	17
3.2	DMRG	18
3.2.1	Algoritmo infinito	19
3.2.2	Algoritmo finito	22
3.2.3	Comparação entre o DMRG e o RG	25
3.2.4	DMRG para sistemas quase-unidimensionais	26
4	Resultados	29
4.1	Spin- $\frac{1}{2}$	29
4.2	Spin-1	32
4.3	Spin- $\frac{3}{2}$	36
4.4	Spin-2	38
4.5	Spin- $\frac{5}{2}$	41
A	Produto tensorial	46
B	Simetrias	51
C	Matriz de Densidade	54
C.1	Propriedades da Matriz de Densidade	55
D	Decomposição do Valor Singular	58
E	Método de Lanczos	61
	Referências Bibliográficas	64

Capítulo 1

Introdução

A primeira descrição teórica de sucesso de metais e isolantes é baseada em elétrons livres ou fracamente interagentes. A distinção entre metais e isolantes a temperatura nula, segundo esta teoria, baseia-se em como as bandas eletrônicas, que surgem devido a periodicidade da rede cristalina, são preenchidas. Essa distinção foi proposta e estabelecida nos primórdios da mecânica quântica. O sucesso desta teoria levou à construção de um dos mais importantes dispositivos eletrônicos da nossa sociedade contemporânea, os transistores; estes estão presentes nos mais variados produtos do nosso cotidiano, como TVs e computadores. Contudo, há uma certa “classe” de compostos no qual a teoria baseada em elétrons livres e/ou fracamente interagentes não descreve corretamente a física observada experimentalmente. Um típico exemplo desta classe é o composto NiO. Enquanto a teoria prevê, neste caso, um estado metálico, observava-se um isolante. Foram Mott e Peierls os primeiros a sugerir que uma forte interação Coulombiana entre os elétrons poderia dar origem ao comportamento isolante [4, 5]. Neste caso, dizemos que o sistema é fortemente correlacionado, e a teoria anterior não se aplica, já que as interações não podem ser tratadas perturbativamente.

Um dos exemplos mais célebres de modelos fortemente correlacionados é o modelo Heisenberg [6]. Este modelo foi proposto, no início do surgimento da mecânica quântica, para explicar o ferromagnetismo. Existem vários outros modelos que o generalizam, tais como o modelo de Hubbard [6] e o modelo de Kondo na rede ferromagnética [7]. Este último modelo é amplamente usado para explicar a magneto-resistência colossal em manganitas [7]. Um fenômeno similar é a magneto-resistência gigante que ocorre em multicamadas compostas por metais magnéticos e não magnéticos. O prêmio Nobel de física de 2007 foi exatamente devido a descoberta deste último fenômeno.

Sistemas fortemente correlacionados podem ser estudados tanto analiticamente quanto numericamente. Fermionização, bosonização e *ansatz* de Bethe são exemplos de técnicas analíticas usadas para o estudo deste tipo de sistema [8–17]. O uso de cada técnica é vinculada

ao tipo do sistema em estudo; por exemplo, a fermionização é útil no estudo de sistemas cujas hamiltonianas possam ser mapeadas em hamiltonianas biquadráticas. Por outro lado, o *ansatz* Bethe é usado para estudar algumas classes de sistemas interagentes que satisfazem a equação de Yang-Baxter [18].

Em contrapartida, as técnicas numéricas de Diagonalização Exata (DE) [19], juntamente com o Grupo de Renormalização da Matriz de Densidade (do inglês *Density Matrix Renormalization Group* - DMRG) [20, 21] (veja também [22, 23]), são sem dúvida as técnicas mais poderosas para o estudo de sistemas fortemente correlacionados quase-unidimensionais a temperatura $T = 0$ ¹, já que podem ser aplicados a vários tipos de sistemas. As técnicas de DE, tais como o método de Lanczos e o método da Potência, são usadas no estudo de sistemas relativamente pequenos. Tal limitação ocorre devido ao fato do espaço de Hilbert crescer exponencialmente com o tamanho do sistema. Por outro lado, o DMRG é a técnica mais poderosa no estudo de sistemas quase-unidimensionais. Através do truncamento do espaço de Hilbert, a técnica permite estudar sistemas grandes.

Neste trabalho, estudaremos as Escadas de Heisenberg de N pernas de spin- S usando o DMRG. Há duas grandes motivações para o estudo de materiais com a geometria de “escadas”. Primeiramente, escadas fornecem um “*playground*” para o estudo de supercondutores de alta temperatura crítica (T_c), uma vez que na ausência de portadores de buraco algumas escadas apresentam um gap de spin (Δ_S) no espectro de energia, ou seja, há um custo de energia finito para criar uma excitação de spin acima do estado fundamental. É importante ressaltar que o interesse em estudar sistemas com geometria de escadas surgiu quando Dagotto *et al.* [26] encontraram teoricamente a existência de um gap de spin finito para a escada de Heisenberg de duas pernas com spin- $\frac{1}{2}$. A segunda motivação para o interesse em sistemas escadas está relacionada com a realização experimental das escadas de N pernas [27, 28]. A motivação fornecida pelos estudos teóricos desencadeou um enorme esforço experimental para sintetizar materiais que são realizações das escadas de N pernas, procurando pelas duas principais predições: a existência de um gap de spin finito e a supercondutividade.

Esta dissertação está organizada em quatro capítulos e cinco apêndices. No capítulo 2, expomos o modelo das escadas de Heisenberg de N pernas, as quais são caracterizadas por N cadeias de íons paralelas com um acoplamento entre as cadeias comparável ao acoplamento ao longo das cadeias. No capítulo 3, discutimos o método do grupo de renormalização da matriz de densidade para sistemas finito e infinito. Mostramos também a extensão do DMRG aplicado ao estudo de sistemas quase-unidimensionais. No capítulo 4, apresentamos nossas estimativas da energia do estado fundamental (e_∞) e do gap de spin (Δ_S), no limite termodi-

¹A técnica de Monte Carlo pode também ser usada, contudo ela “falha” para sistemas frustados devido ao famoso problema do sinal fermiônico [24, 25].

nâmico, das escadas de Heisenberg de N pernas com spin- S , assim como uma estimativa do valor de e_∞ do modelo de Heisenberg bidimensional com spin- S . No apêndice A, definimos o produto tensorial e discutimos algumas de suas propriedades. No apêndice B expomos as simetrias que usamos para investigar o modelo de Heisenberg. No apêndice C, fazemos um resumo das propriedades da matriz de densidade que são úteis para o entendimento do DMRG. No apêndice D, mostramos o teorema da decomposição do valor singular. E por fim, no apêndice E apresentamos a técnica de diagonalização numérica de Lanczos.

Capítulo 2

As Escadas de Heisenberg de N pernas

O modelo de Heisenberg foi proposto, no início da mecânica quântica, para estudar sistemas magnéticos. O modelo considera spins fixos em uma rede regular que representa a estrutura cristalina do material. As variáveis relevantes para a descrição teórica desses sistemas são as orientações dos momentos magnéticos (orientações dos spins da rede). Entre um par de spins vizinhos acontece uma interação, conhecida como interação de troca. Esta interação é caracterizada por um acoplamento J entre os momentos magnéticos que expressa essencialmente a energia necessária para mudar o sentido do momento magnético (spin) na presença de outro. O valor de J pode ser positivo ou negativo. Para J positivo (negativo) dizemos que o sistema é ferromagnético (antiferromagnético), pois a energia mais baixa ocorre quando os spins se orientam paralelamente (antiparalelamente) em uma dada direção.

A versão unidimensional do modelo de Heisenberg com condições de contorno abertas, para uma cadeia de tamanho L , é dada por:

$$\hat{H} = J \sum_{i=1}^{L-1} (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z), \quad (2.1)$$

sendo S_i^x , S_i^y e S_i^z os operadores de spin no sítio i . O operador S_i^α , com $\alpha = x, y$ e z , é representado matricialmente por:

$$S_i^\alpha = \left(\underbrace{1}_1 \otimes \cdots \otimes \underbrace{1}_{i-1} \otimes \underbrace{S_i^\alpha}_i \otimes \underbrace{1}_{i+1} \otimes \cdots \otimes \underbrace{1}_L \right), \quad (2.2)$$

sendo que o símbolo \otimes representa o produto de Kronecker, também conhecido como produto tensorial. Algumas propriedades do produto tensorial são apresentadas no apêndice A.

Para o caso de spin- $\frac{1}{2}$, as matrizes S^x , S^y e S^z são os operadores de spin- $\frac{1}{2}$, que em unidade de \hbar são dados respectivamente por:

$$S^x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

$$S^y = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

e

$$S^z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$

É conveniente expressarmos a hamiltoniana (2.1) em termos dos bem conhecidos operadores de levantamento/abaixamento (S^+/S^-), dados por:

$$S^+ = S^x + iS^y, \quad (2.6)$$

$$S^- = S^x - iS^y. \quad (2.7)$$

Assim, a hamiltoniana (2.1) é expressa como:

$$H = J \sum_{i=1}^{L-1} \left[S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \right]. \quad (2.8)$$

No caso de spin- S , a construção dos operadores de spin, em unidade de \hbar , obedece às seguintes equações [29]:

$$S^z |S, m\rangle = m |S, m\rangle, \quad (2.9)$$

$$S^+ |S, m\rangle = \sqrt{(S-m)(S+m+1)} |S, m+1\rangle, \quad (2.10)$$

$$S^- |S, m\rangle = \sqrt{(S+m)(S-m+1)} |S, m-1\rangle, \quad (2.11)$$

sendo m o autovalor de S^z , cujos valores são: $-S, -S+1, \dots, S-1, S$.

Vale salientar que existem na natureza compostos que são realizações experimentais da cadeia de Heisenberg de spin- S [30–42]. Na tabela 2.1, exibimos alguns destes compostos.

Por completeza, exibiremos a estrutura cristalina de alguns compostos que apresentamos na tabela 2.1. Na figura 2.1, mostramos a estrutura do composto Sr_2CuO_3 que é uma realização experimental da cadeia de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$. A explicação deste composto comportar-se unidimensionalmente reside no fato de que os planos ao longo do eixo c (veja figura 2.1) são fracamente interagentes devido à anisotropia entre eles, de modo que podemos

Tabela 2.1: Exemplos de compostos que são realizações experimentais da cadeia de Heisenberg de spin- S .

S	Composto(s)
$\frac{1}{2}$	Sr_2CuO_3 , SrCuO_2 , CuGeO_3 e KCuF_3
1	$\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$, AgVP_2S_6 e CsNiCl_3
$\frac{3}{2}$	CsVCl_3 e AgCrP_2O_6
2	$\text{MnCl}_3(\text{bipy})$

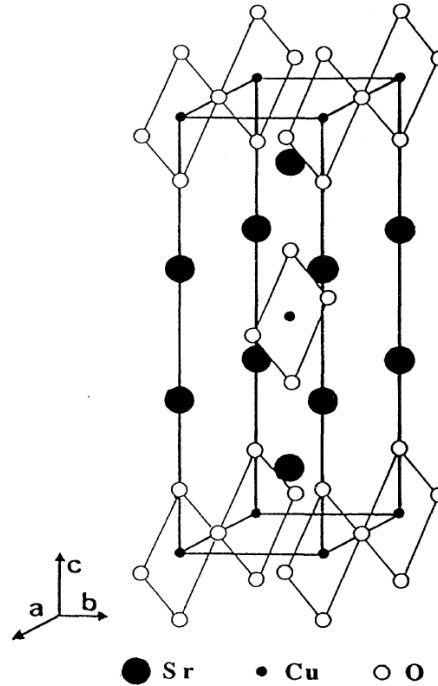


Figura 2.1: Estrutura cristalina do composto Sr_2CuO_3 . As cadeias Cu – O são paralelas ao eixo a[31]. O acoplamento J ao longo da cadeia é muito maior do que o acoplamento J_\perp entre as cadeias ($\frac{J_\perp}{J} \sim 10^{-5}$), de modo que as cadeias podem ser consideradas desacopladas, dando assim o “caráter unidimensional” ao composto [33].

considerar estes planos desacoplados. É conhecido também que o acoplamento J ao longo das cadeias (acoplamento ao longo do eixo a) é muito maior que o acoplamento J_\perp entre as cadeias (acoplamento ao longo do eixo b). Dessa forma, podemos desprezar a interação entre as cadeias, dando assim o caráter unidimensional para este composto.

Na figura 2.2 exibimos a estrutura do composto $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$, também conhecido como NENP, que é uma realização experimental da cadeia de Heisenberg de spin-1, onde os íons magnéticos são os íons de Ni.

O composto $\text{MnCl}_3(\text{bipy})$ é uma verificação experimental da cadeia de Heisenberg de spin-2. O termo (bipy) representa a (2,2'-bipiridina), $\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2$. Este composto consiste de

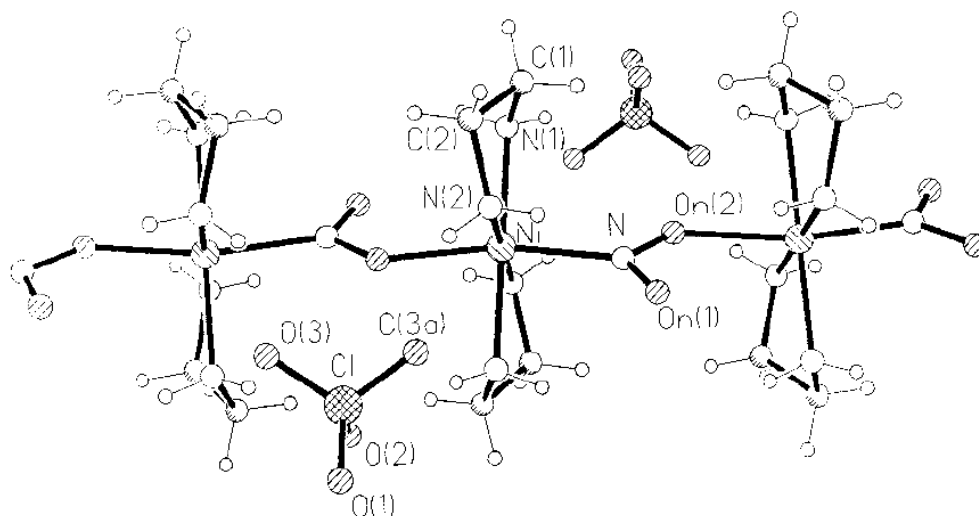


Figura 2.2: Estrutura cristalina do composto $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$ (NENP) [38].

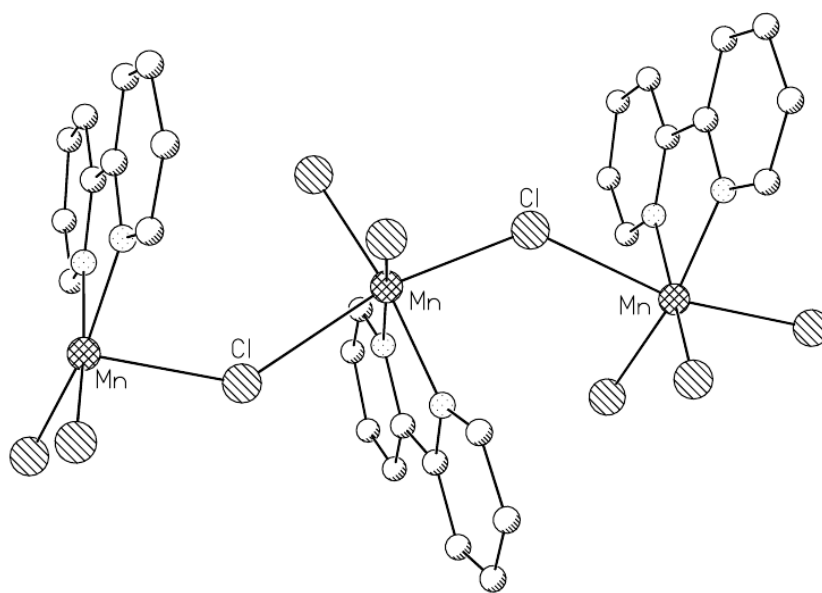


Figura 2.3: Estrutura do cristal $\text{MnCl}_3(\text{bipy})$ [42].

uma cadeia quase-linear de íons de $\text{Mn}^{3+}(S = 2)$, assimetricamente conectados por pontes de íons Cl^- , como ilustrado na figura 2.3 [42].

Vale salientar que o avanço de técnicas experimentais de síntetização de materiais tem possibilitado a construção de alguns materiais com *tamanhos finitos* bem definidos, como por exemplo, os materiais em estudo nas referências [43, 44]. Devido a este avanço, há também um grande interesse em determinar propriedades físicas de sistemas de *tamanhos finitos*. Os compostos Cr_7Cd [43] e $[(\text{C}_3\text{H}_7)_2\text{NH}_2][\text{Fe}_7\text{MnF}_8\{\text{O}_2\text{CC}(\text{CD}_3)_3\}_{16}]$ [44] são exemplos de

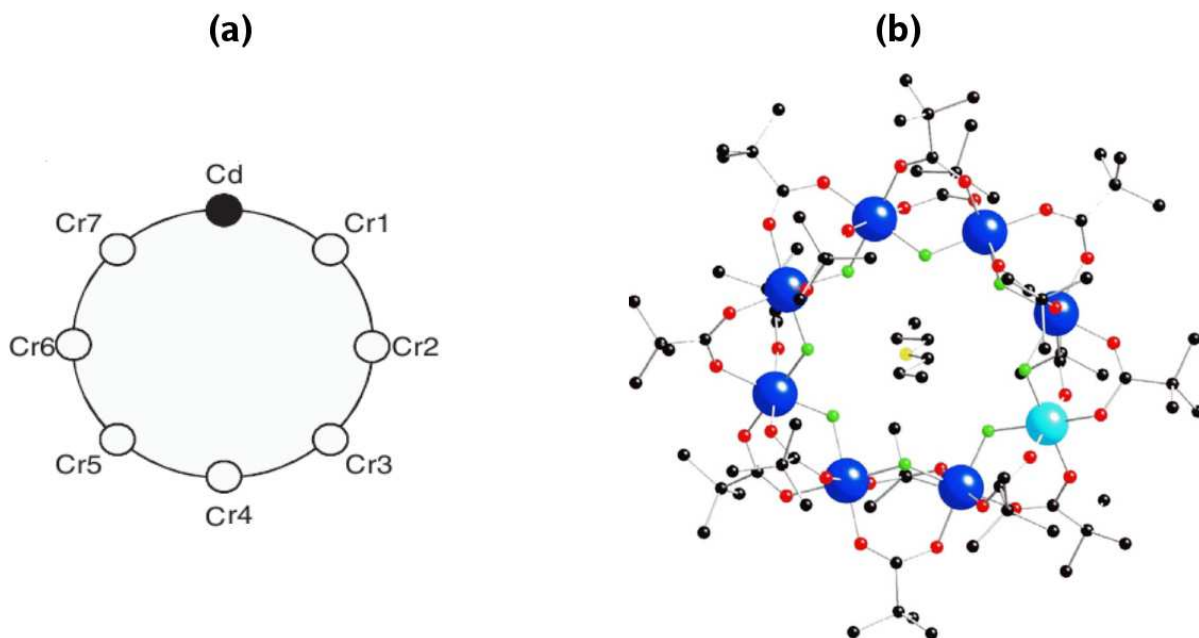


Figura 2.4: (a) Estrutura cristalina do composto Cr₇Cd [43]. (b) Estrutura molecular do composto [(C₃H₇)₂ NH₂] [Fe₇MnF₈ {O₂CC(CD₃)₃}₁₆]. Esquema de cores: Fe, círculo em azul escuro; Mn, círculo em azul claro; F, círculo em verde; O círculo em vermelho; C, círculo em preto; N, círculo em amarelo. Os átomos de hidrogênio são omitidos na figura [44].

realizações experimentais do modelo de Heisenberg de tamanho finito.¹ A nível ilustrativo, apresentamos as estruturas destes compostos na figura 2.4.

A cadeia de Heisenberg de spin- S foi amplamente estudada na literatura [45–66]. Conforme já mencionamos, a maioria das cadeias quânticas não são passíveis de solução exata. Contudo, é possível obter a solução analítica do modelo de Heisenberg *clássico* de spin- S unidimensional (modelo de Ising) via matriz de transferência. Nesta linha, encontramos a solução do modelo de Heisenberg clássico com spins “mistos” S e S' [67].

Neste trabalho, focaremos apenas no caso quântico, em particular, nas escadas de Heisenberg de N pernas com spin- S . O estudo teórico e experimental de estruturas iônicas contendo a geometria de “escadas” tem atraído uma atenção considerável da comunidade da física da matéria condensada. Por esta razão acreditamos que um estudo detalhado das escadas de Heisenberg é altamente almejado.

As escadas de N pernas são definidas por N cadeias paralelas de íons com ligação entre elas, tal que o acoplamento J entre as cadeias é comparável ao acoplamento J_{\perp} entre as

¹O modelo que descreve esses compostos além de considerar a interação de primeiros vizinhos $\vec{S}_i \vec{S}_{i+1}$ também considera, por exemplo, outros termos, tais como interação de segundos vizinhos e interação dos spin com um campo externo.

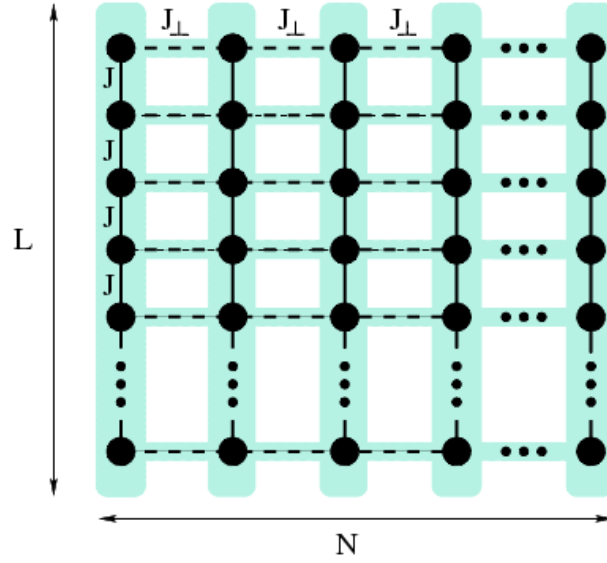


Figura 2.5: Representação esquemática das escadas de Heisenberg de N pernas com acoplamento J ao longo das cadeias e acoplamento J_{\perp} entre as cadeias.

mesmas.² O caso particular de $N = 2$ motiva o nome “escada” para essa geometria. O acoplamento entre as escadas é ao longo dos “degraus”, linguagem também estendida aos sistemas de N pernas (veja figura 2.5).

A hamiltoniana do modelo é definida como:

$$\hat{H} = J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{L-1} \vec{S}_{i,j} \vec{S}_{i,j+1} + J_{\perp} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^L \vec{S}_{i,j} \vec{S}_{i+1,j}, \quad (2.12)$$

sendo $\vec{S}_{i,j}$ ($\vec{S}_{i,j} = S_{i,j}^x \hat{x} + S_{i,j}^y \hat{y} + S_{i,j}^z \hat{z}$) o operador spin, L o número de degraus e N o número de pernas. O primeiro termo da equação (2.12) representa o termo de interação de primeiros vizinhos dos spins ao longo da cadeia e o segundo termo considera a interação entre as cadeias, isto é, a interação de primeiros vizinhos ao longo dos degraus.

Vale mencionar que os compostos SrCu_2O_3 e $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ são realizações experimentais das escadas de Heisenberg de $\text{spin}-\frac{1}{2}$ com duas e três pernas, respectivamente. Na figura 2.6, apresentamos uma representação esquemática da estrutura destes compostos. A partir desta figura, podemos ver que nos planos de Cu-O existem ligações Cu – O – Cu que formam 180° (ligações ao longo da cadeia e dos degraus) e ligações Cu – O – Cu que formam 90° (ligações entre as escadas). É esperado que as ligações de 180° sejam antiferromagnéticas fortes, enquanto que as ligações de 90° sejam ferromagnéticas fracas, de modo que podemos considerar as escadas desacopladas [68–70].

²Se $J_{\perp} = 0$ temos que as cadeias são desacopladas.

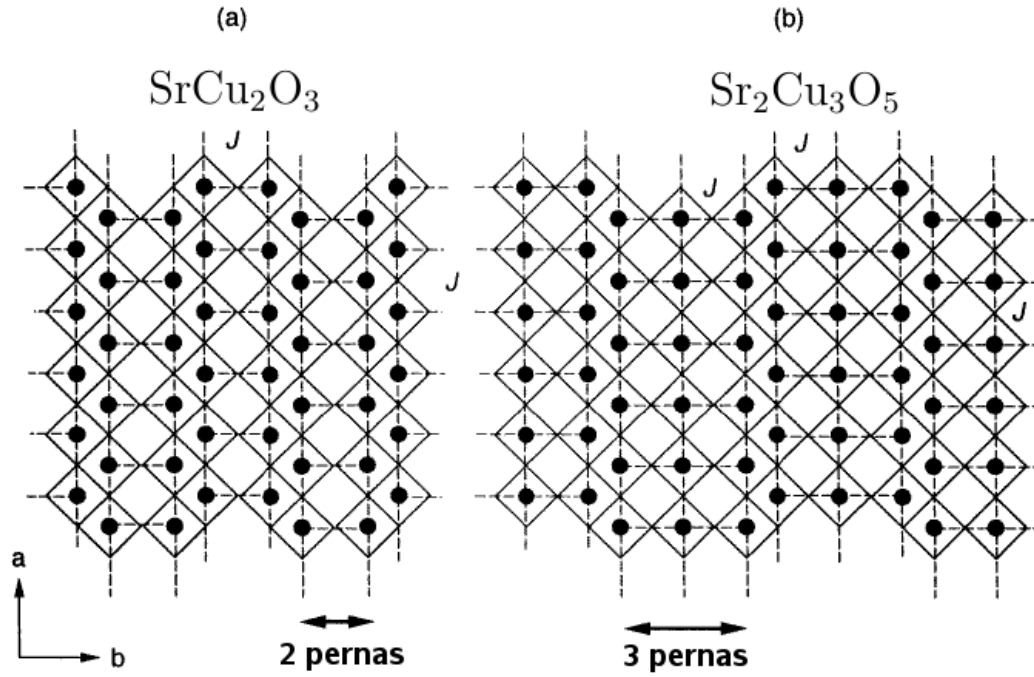


Figura 2.6: Representação esquemática das escadas de duas (a) e três pernas (b). Os círculos preenchidos são os íons de Cu^{2+} e os íons de O^{2-} estão localizados nos vértices dos quadrados desenhados pelas linhas sólidas [27]. Os spins de Cu são fortemente acoplados uns com os outros via uma interação de supertroca uniforme dentro de cada escada, enquanto que as escadas são separadas umas das outras, uma vez que há uma fraca interação de supertroca devido as ligações $\text{Cu} - \text{O} - \text{Cu}$ de 90° (veja texto).

Outro composto que é exemplo de realização experimental da escada de Heisenberg de duas pernas é o pirofosfato de vanadil $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$. Sua estrutura é mostrada na figura 2.7.

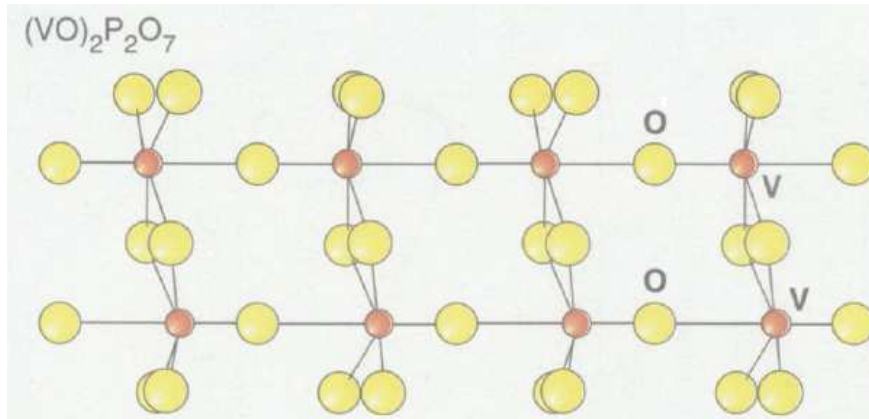


Figura 2.7: Estrutura do composto de duas pernas $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ [7].

Através de medidas de susceptibilidade magnética em compostos escadas de spin- $\frac{1}{2}$ foram

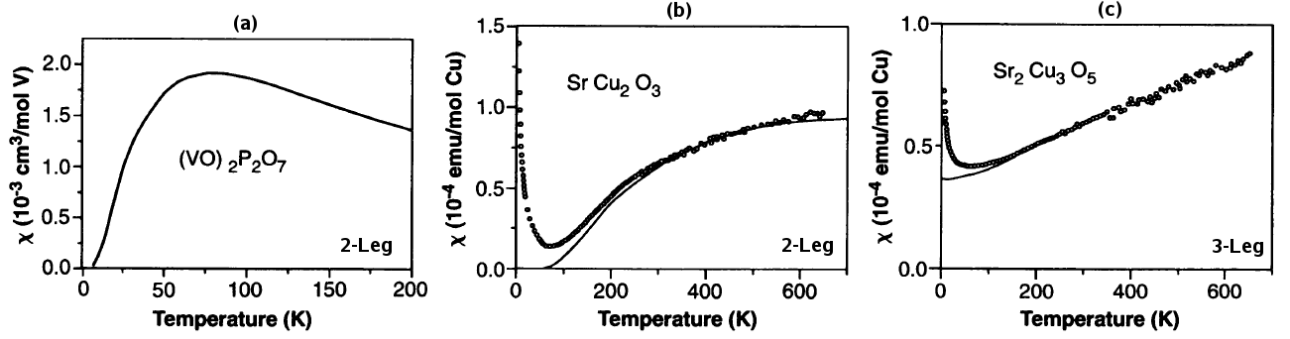


Figura 2.8: Resultados experimentais da susceptibilidade magnética $\chi(T)$ dos compostos com geometria de escadas (a) $(VO)_2P_2O_7$ [28], (b) $SrCu_2O_3$ e (c) $Sr_2Cu_3O_5$ [27]. As linhas sólidas representam a susceptibilidade corrigida, depois de subtrair dos dados originais a componente de Curie para baixas temperaturas. A componente de Curie é atribuída à contribuição de uma porcentagem de íons livres que surgem devido às imperfeições da rede ou impurezas. Os dados corrigidos em (b) são perfeitamente fitados assumindo um gap de spin de $420K$ a partir da equação $\chi(T) \propto T^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\Delta_S}{T}}$ [71].

encontrado comportamentos distintos do gap de spin, Δ_S , dependendo da paridade do número de pernas das escadas. Na figura 2.8, mostramos resultados experimentais da susceptibilidade magnética para os compostos $(VO)_2P_2O_7$, $SrCu_2O_3$ e $Sr_2Cu_3O_5$.

A assinatura da existência de um gap de spin finito na susceptibilidade magnética χ , reside no fato de que para baixas temperaturas χ tende a zero, enquanto que para sistemas com gap de spin nulo χ tende a um valor finito. Desse modo, podemos notar, a partir da figura 2.8, que as escadas de duas pernas apresentam um gap de spin finito, enquanto que a escada de três pernas tem gap de spin nulo.

A diferença do comportamento do gap de spin para o modelo das escadas de Heisenberg de spin- S já é bem conhecida. Haldane [1, 2] mapeou o modelo de Heisenberg unidimensional (escada de uma perna) no modelo sigma não linear e encontrou que o gap de spin é nulo para cadeias com spin semi-inteiro e finito para cadeias com spin inteiro. Uma generalização desta conjectura foi feita para as escadas de N pernas por Sierra [3]. Sierra encontrou que o gap de spin das escadas não depende somente do valor do spin, mas também do número de pernas. Escadas de spin semi-inteiro com um número ímpar (par) de pernas exibem um gap de spin nulo (finito), enquanto que escadas de spin inteiro exibem um gap de spin finito. É esperado também que o gap de spin para escadas de spin- $\frac{1}{2}$ tenha um decrescimento com o número de pernas, uma vez que devemos recuperar o limite de um plano bidimensional de gap nulo, na medida que N cresce. Mas, vale ressaltar que a magnitude do gap de spin permanecerá diferente de zero para qualquer valor de N finito e par.

Determinar o que acontece quando o número de pernas das escadas aumenta não é uma

busca puramente acadêmica. Materiais tais como $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$ possuem geometria de escada com um número de pernas que depende do valor de n da seguinte forma $N = \frac{1}{2}(n + 1)$ [68, 69].

Uma forma simples de entender a dependência do gap de spin com o número de pernas das escadas é através da análise do limite de acoplamento forte, i. e., $J_{\perp} \gg J$. Por simplicidade, analisaremos o caso da escada de Heisenberg de duas pernas com $\text{spin} = \frac{1}{2}$. Neste limite, os spins da escada de duas pernas formarão singletos ao longo dos degraus (com spin total $s = 0$), como ilustrado na figura 2.9. Dessa forma, haverá um custo de energia finito e não nulo para criar uma excitação acima do estado fundamental. Por outro lado, o caso de uma escada de três pernas (ou um número ímpar de pernas) o estado fundamental é degenerado no limite de acoplamento forte. Neste caso, pode-se usar teoria de perturbação para sistemas degenerados e mostrar que a escada de três pernas é mapeada em uma cadeia de Heisenberg de $\text{spin} = \frac{1}{2}$ [72], a qual possui um gap de spin nulo.

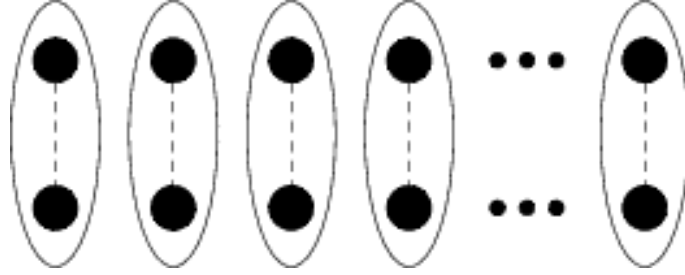


Figura 2.9: Representação esquemática de uma escada de duas pernas no limite $J_{\perp} \gg J$.

White *et. al* [73], usando o DMRG, calcularam o valor do gap de spin das escadas de Heisenberg de $\text{spin} = \frac{1}{2}$. Eles encontraram que o gap de spin é nulo para escadas com pernas ímpares, enquanto que escadas com pernas pares apresentam um gap de spin finito. Na figura 2.10, apresentamos seus resultados.

No mesmo contexto, Frischmuth e colaboradores [74], através de cálculos de susceptibilidade magnética em função da temperatura, usando a técnica de Monte Carlo, encontraram também a evidência de um gap de spin nulo para escadas de $\text{spin} = \frac{1}{2}$ com pernas ímpares, e um gap de spin finito para escadas com pernas pares. Os resultados da susceptibilidade magnética encontrados por esses autores são mostrados na figura 2.11, por completeza. Estes autores também estimaram o valor de e_{∞} das escadas de Heisenberg de $\text{spin} = \frac{1}{2}$ com até seis pernas [74]. Conforme veremos, nossos resultados estão em pleno acordo com os obtidos por Frischmuth *et al.* [74]. Nossa contribuição original no estudo das escadas de Heisenberg será a investigação delas para o caso de spin $S > \frac{1}{2}$, os quais serão apresentadas no capítulo 4.

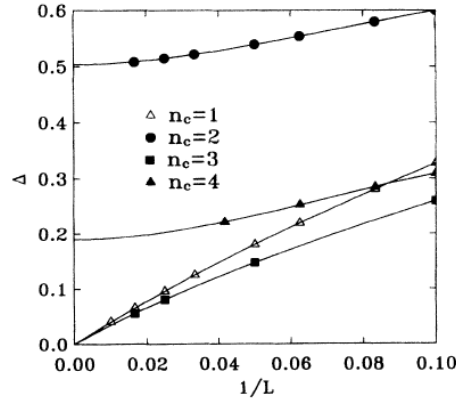


Figura 2.10: Gap de spin das escadas de Heisenberg de n_c pernas, com $\text{spin}-\frac{1}{2}$, em função de $\frac{1}{L}$. Figura extraída da referência [73].

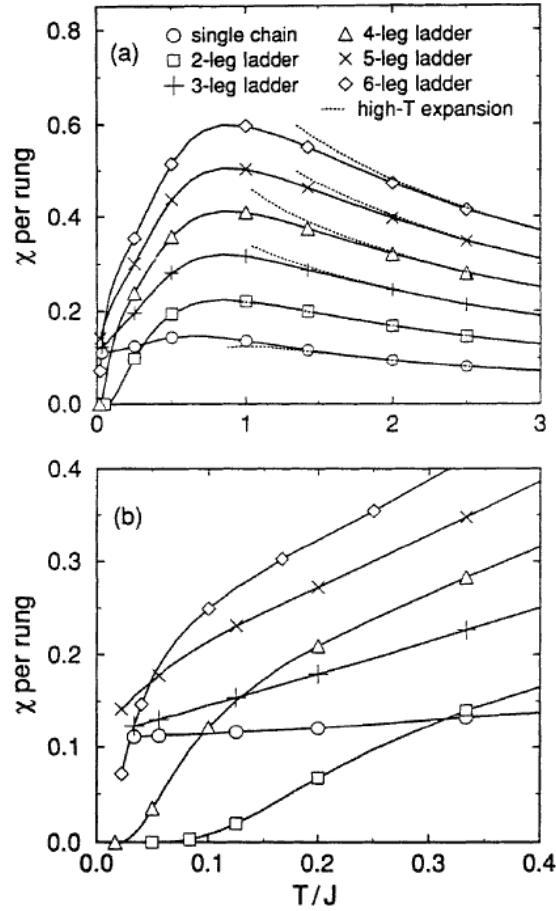


Figura 2.11: Susceptibilidade magnética da cadeia e das escadas de Heisenberg de $\text{spin}-\frac{1}{2}$ com até seis pernas obtidas por Frischmuth e colaboradores [74], usando a técnica de Monte Carlo. As duas figuras diferem do alcance de temperatura analisado. Podemos ver claramente em (b) a diferença qualitativa entre escadas com pernas pares e ímpares, como discutido no texto.

Capítulo 3

Técnicas Numéricas

Para se determinar as propriedades físicas de um sistema de partículas é necessário calcularmos as energias da Hamiltoniana. O uso de técnicas numéricas para determinar as autoenergias é útil, visto que muitos dos sistemas de interesse não possuem solução analítica conhecida.

Em mecânica quântica é possível escrever operadores, em particular hamiltonianas, na forma matricial. Assim, determinar as energias de uma hamiltoniana resume-se em encontrar os autovalores da mesma, ou seja, diagonalizá-la. Em geral, estamos interessados na física de baixas energias. Por esta razão, o nosso interesse é determinar apenas alguns dos autovalores (mais baixos) da hamiltoniana.

Os esforços na implementação de técnicas numéricas concentram-se na tentativa de estudar sistemas cada vez maiores, pois, em geral, estamos interessados nas propriedades do sistema no limite termodinâmico. O fato do espaço de Hilbert crescer exponencialmente com o tamanho do sistema torna-se uma limitação na abordagem de sistemas grandes. Desse modo, é necessário encontrar uma maneira para que o espaço de Hilbert seja truncado, sem que haja perda na descrição das propriedades físicas de interesse. Antes de apresentarmos alguns procedimentos de truncagem do espaço de Hilbert, vamos ilustrar como podemos crescer um sistema de interesse, a partir de subsistemas menores ¹. Usaremos como exemplo o modelo de Heisenberg unidimensional de spin- S , com condições de contorno abertas, cuja hamiltoniana é dada por:

$$\hat{H} = J \sum_{i=1}^{L-1} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} = J \sum_{i=1}^{L-1} \left[S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \right]. \quad (3.1)$$

Consideraremos a cadeia de L sítios formada por: dois sítios, um bloco à esquerda A e um bloco à direita B , ambos contendo $\frac{L}{2} - 1$ sítios, como ilustrado na figura 3.1. Rotularemos a

¹Tal procedimento será também utilizado no DMRG.

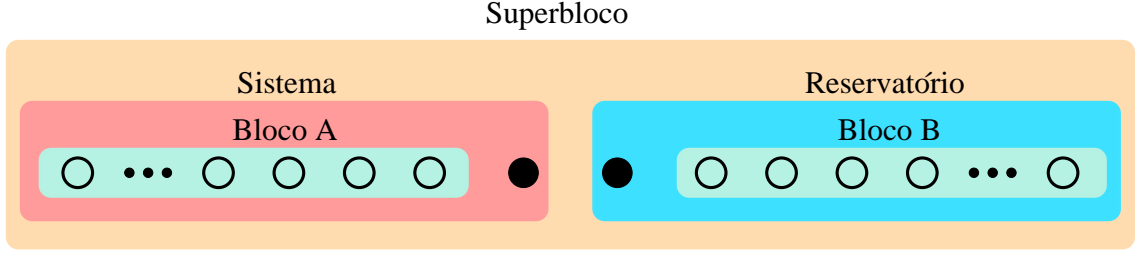


Figura 3.1: Representação esquemática de uma cadeia (superbloco). O superbloco é composto de duas partes: sistema e reservatório.

parte da esquerda (direita) formada por um sítio e pelo bloco A (B) de sistema (reservatório). O conjunto sistema + reservatório é chamado de universo ou superbloco. Podemos utilizar o sistema e o reservatório (formado por $\frac{L}{2}$ sítios) de uma cadeia de L sítios para construir uma cadeia de tamanho $L' = L + 2$. Para tanto, consideramos o bloco A (B) da cadeia de tamanho $L' = L + 2$ constituído do sistema (reservatório) da cadeia de tamanho L mais dois “novos sítios”². Este procedimento é ilustrado na figura 3.2, para o caso de $L = 4$.

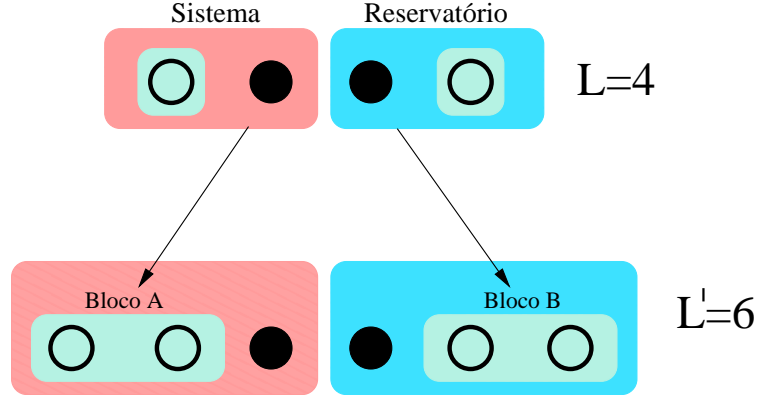


Figura 3.2: Representação esquemática do procedimento de crescimento de uma cadeia de tamanho $L = 4$ para uma cadeia com $L' = L + 2$. O bloco A (B) da cadeia de tamanho $L' = 6$ é exatamente o sistema (reservatório) da cadeia de tamanho $L = 4$.

Podemos utilizar este procedimento iterativamente para “crescermos” o superbloco indefinidamente. Contudo, este procedimento é limitado, pois o espaço de Hilbert crescerá exponencialmente com o tamanho do sistema, de modo que problema ficará intratável mesmo numericamente. Neste primeiro momento não nos preocuparemos com isso. Este problema será contornado mais adiante, num processo de truncagem.

Vamos primeiro especificar de forma clara como crescemos o superbloco em termos dos operadores de spin. Denotamos ${}^i H_A$ [${}^i H_B$] a hamiltoniana do bloco A [B] e m_A^i [m_B^i] a sua

²O sistema/reservatório são construídos previamente quando consideramos a cadeia de tamanho L .

dimensão na i -ésima iteração³. A hamiltoniana do sistema [reservatório], constituído pelo bloco A [B] mais um sítio, é denotada por ${}^iH_{A\bullet}$ [${}^iH_{\bullet B}$] cuja dimensão é $m_{sis} = m_A^i(2S+1)$ [$m_{res} = m_B^i(2S+1)$]. Note que a dimensão do espaço de Hilbert do superbloco é $(2S+1)^2 m_A^i m_B^i$, e sua hamiltoniana é escrita como:

$${}^iH_{A\bullet\bullet B} = {}^iH_{A\bullet} \otimes 1_{res} + 1_{sis} \otimes {}^iH_{\bullet B} + [1_A \otimes S^z \otimes S^z \otimes 1_B + \frac{1}{2} (1_A \otimes S^+ \otimes S^- \otimes 1_B + 1_A \otimes S^- \otimes S^+ \otimes 1_B)] , \quad (3.2)$$

onde 1_{sis} (1_{res}) é a identidade com a dimensão do sistema (reservatório) e 1_A (1_B) tem a dimensão do bloco A (B) ⁴. As hamiltonianas do sistema (${}^iH_{A\bullet}$) e do reservatório (${}^iH_{\bullet B}$) são dadas, respectivamente, por:

$${}^iH_{A\bullet} = {}^iH_A \otimes 1_{sitio} + {}^iS_e^z \otimes S^z + \frac{1}{2} ({}^iS_e^+ \otimes S^- + {}^iS_e^- \otimes S^+) , \quad (3.3)$$

$${}^iH_{\bullet B} = 1_{sitio} \otimes {}^iH_B + S^z \otimes {}^iS_d^z + \frac{1}{2} (S^+ \otimes {}^iS_d^- + S^- \otimes {}^iS_d^+) , \quad (3.4)$$

com ${}^iH_A = {}^{i-1}H_{A\bullet}$ (obtido da iteração anterior). A matriz identidade 1_{sitio} tem dimensão $(2S+1)$. Os operadores que atuam nas bordas dos blocos ${}^iS_e^\alpha / {}^iS_d^\alpha$ ($\alpha = z, \pm$), na i -ésima iteração, são definidos como⁵:

$${}^iS_e^\alpha = \underbrace{1_{sitio} \otimes 1_{sitio} \otimes \cdots \otimes 1_{sitio}}_{(i-1) \text{ vezes}} \otimes S^\alpha , \quad (3.5)$$

$${}^iS_d^\alpha = S^\alpha \otimes \underbrace{1_{sitio} \otimes 1_{sitio} \otimes \cdots \otimes 1_{sitio}}_{(i-1) \text{ vezes}} . \quad (3.6)$$

Note que a hamiltoniana do bloco A [B] durante a iteração $i+1$ é igual a hamiltoniana do sistema [reservatório] da iteração i , isto é, ${}^{i+1}H_A = {}^iH_{A\bullet}$ [${}^{i+1}H_B = {}^iH_{\bullet B}$] com dimensão $m_A^{i+1} = m_A^i(2S+1)$ [$m_B^{i+1} = m_B^i(2S+1)$]. Já a dimensão do superbloco na iteração $i+1$ é $m_A^i m_B^i (2S+1)^4$. Desejamos de alguma maneira truncar o espaço de Hilbert, para que a dimensão do superbloco não continue crescendo a cada iteração. A idéia será considerar apenas $m < m_A^{i+1} [m' < m_B^{i+1}]$ estados da hamiltoniana que representa o bloco A [B].

Antes de expormos como serão selecionados os m (m') estados do bloco A [B], é conveniente perceber que se fizermos uma transformação unitária ${}^i\tilde{O}^e = {}^iO^e \otimes 1_{res}$ [${}^i\tilde{O}^d = 1_{sis} \otimes {}^iO^d$],

³Embora neste procedimento $m_A^i = m_B^i = (2S+1)^i$, denotaremos estas dimensões com variáveis distintas, pois uma variação do procedimento adotado aqui será utilizado mais a frente.

⁴A dimensão de 1_{sis} [1_{res}] é $(2S+1)m_A^i$ [$(2S+1)m_B^i$] e a dimensão de 1_A [1_B] é m_A^i [m_B^i].

⁵O índice e (d) denota que o operador atua na borda esquerda (direita) do bloco A (B).

associada com o bloco do sistema [reservatório], os autovalores do superbloco na i -ésima iteração ficam inalterados. A hamiltoniana iH_A e os operadores ${}^iS_e^\alpha$ sujeitos a esta transformação, transformam-se da seguinte forma

$$\left({}^i\tilde{H}_A\right)_{(2S+1)m_A^i, (2S+1)m_A^i} = {}^iO_{(2S+1)m_A^i, (2S+1)m_A^i}^e \left({}^{i-1}H_{A\bullet}\right)_{(2S+1)m_A^i, (2S+1)m_A^i} {}^iO_{(2S+1)m_A^i, (2S+1)m_A^i}^{e\dagger}, \quad (3.7)$$

e

$$\left({}^i\tilde{S}_e^\alpha\right)_{(2S+1)m_A^i, (2S+1)m_A^i} = {}^iO_{(2S+1)m_A^i, (2S+1)m_A^i}^e \left({}^iS_e^\alpha\right)_{(2S+1)m_A^i, (2S+1)m_A^i} {}^iO_{(2S+1)m_A^i, (2S+1)m_A^i}^{e\dagger}, \quad (3.8)$$

onde explicitamos as dimensões das matrizes. Assim, se desejamos considerar apenas alguns estados (ou combinação deles), basta considerarmos ${}^iO^e$ uma matriz retangular, isto é, ${}^iO_{m, (2S+1)m_A^i}^e$, de modo que ${}^i\tilde{H}_A$ e ${}^i\tilde{S}_e^\alpha$ terão dimensões $m \times m$. De forma análoga, é possível truncar o espaço de Hilbert dos operadores iH_B e ${}^iS_d^\alpha$.

O processo mencionado acima pode ser repetido indefinidamente, uma vez que o superbloco continuará com a dimensão $(2S+1)^2m^2 \times (2S+1)^2m^2$. Claramente, como estamos jogando alguns/vários estados fora, a princípio sem nenhum critério, nada garante que ${}^{i+1}H_A \equiv \left({}^i\tilde{H}_A\right)_{m,m}$ está sendo bem representado. O cerne do DMRG está exatamente neste ponto. Abaixo discutiremos dois critérios que são utilizados para construir as matrizes de transformação ${}^iO^e / {}^iO^d$.

3.1 O Grupo de Renormalização

Na década de 70, Keneth G. Wilson desenvolveu o Grupo de Renormalização (RG) para resolver o problema Kondo [75]. Depois do sucesso de Wilson, houve um considerável interesse em aplicar a mesma técnica em outros problemas. Em particular, parecia que diversos sistemas quânticos de rede (tais como o modelo de Heisenberg e o modelo de Hubbard) poderiam ser tratados com o RG. Era esperado que o RG produziria resultados ao menos qualitativamente confiáveis para outros modelos. Infelizmente, a aproximação provou não ser confiável [76–79], particularmente em comparação com outros métodos numéricos, tais como Monte Carlo e diagonalização exata.

A idéia central por trás do método do RG é que os estados que correspondem a altas energias não são importantes na descrição da física de baixas energias. Isto sugere que podemos construir um sistema a partir de subsistemas menores, nos quais somente graus de liberdade de baixas energias são retidos. Dessa forma, no RG, a matriz de mudança de

base $^iO^e$ é construída colocando os m autoestados $(|u_\alpha\rangle, \alpha = 1, 2, \dots, m)$ de menor energia do sistema/reservatório em suas linhas. Em outras palavras, a base usada para descrever as hamiltonianas dos blocos e os operadores que atuam nas bordas, é o conjunto dos m autoestados do sistema de mais baixas energias. Alguns resultados da energia da cadeia de Heisenberg, obtidos usando o RG, serão apresentados na seção 3.2.3.

3.2 DMRG

A aproximação da matriz de densidade foi desenvolvida por White [20, 21] para contornar os problemas de acurácia surgidos no grupo de renormalização padrão no estudo de sistemas quânticos de rede. Desde então, a aproximação tem sido usada em uma variedade de problemas em diversos campos da física quântica e até mesmo em química quântica. Muitas das aplicações do DMRG são resumidas nos artigos [80, 81]. Nas duas últimas décadas, este método tem se estabelecido como o método mais poderoso no estudo de propriedades tanto estáticas (energia, parâmetro de ordem, funções de correlação), quanto dinâmicas em sistemas fortemente correlacionados unidimensionais, tais como fator de estrutura dinâmico e condutividade dependente da frequência [82–85].

Originalmente, o DMRG tem sido considerado uma extensão do grupo de renormalização padrão. A idéia geral do DMRG é renormalizar um sistema usando a informação fornecida pela matriz de densidade reduzida, ao invés da hamiltoniana; daí o nome renormalização da matriz de densidade. No apêndice C, apresentamos um resumo das principais propriedades da matriz de densidade.

A idéia principal no método do grupo renormalização da matriz de densidade é definir um procedimento para produzir um conjunto de estados que melhor representem um estado $|\psi\rangle$ (em geral o estado fundamental do superbloco), conforme explicaremos a seguir. Seja um estado $|\psi\rangle$, de um superbloco bipartido, dado por:

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle, \quad (3.9)$$

sendo $|i\rangle$ [$i = 1, \dots, m_A(2S + 1)$] e $|j\rangle$ [$j = 1, \dots, m_B(2S + 1)$] o conjunto completo de estados do sistema e do resto do universo, respectivamente. Desejamos encontrar $m < m_A(2S + 1)$ estados $|u_\alpha\rangle$, tal que,

$$|\psi\rangle \approx |\tilde{\psi}\rangle = \sum_{\alpha j} a_{\alpha j} |u_\alpha\rangle |j\rangle. \quad (3.10)$$

Como queremos que $|\tilde{\psi}\rangle$ seja o mais “próximo” possível de $|\psi\rangle$, devemos minimizar $\mathcal{S} = ||\psi\rangle - |\tilde{\psi}\rangle|^2$. Usando a decomposição do valor singular (veja apêndice D), White [21] mostrou

que os estados que devem ser considerados na construção da matriz O , isto é, que minimiza \mathcal{S} , não são os autoestados de menor energia do sistema, mas sim os autoestados de maior autovalor da matriz de densidade reduzida do sistema, dada por:

$$\rho_{A\bullet} = \text{tr}_{\bullet B}(|\psi\rangle\langle\psi|). \quad (3.11)$$

O estado $|\psi\rangle$, usado na construção da matriz de densidade, é chamado de estado alvo. O procedimento de dizimação do espaço de Hilbert, mediado pela matriz de densidade, é a chave do sucesso do DMRG. Tal fato será visto na seção 3.2.3. Vale mencionar que uma abordagem pedagógica do DMRG pode ser encontrada na referência [22].

3.2.1 Algoritmo infinito

O algoritmo infinito é com certeza a versão mais simples do DMRG de ser implementada. Esta versão considera uma cadeia cujo tamanho cresce iterativamente, usualmente $L = 4, 6, 8, \dots$ (ver figura 3.3), e descarta um número suficiente de estados para que o tamanho do espaço de Hilbert retido seja tratável numericamente. Nós supomos que os recursos numéricos são suficientes para lidar com um espaço reduzido de estados do bloco de dimensão máxima $m_{\max} \sim 4000$.

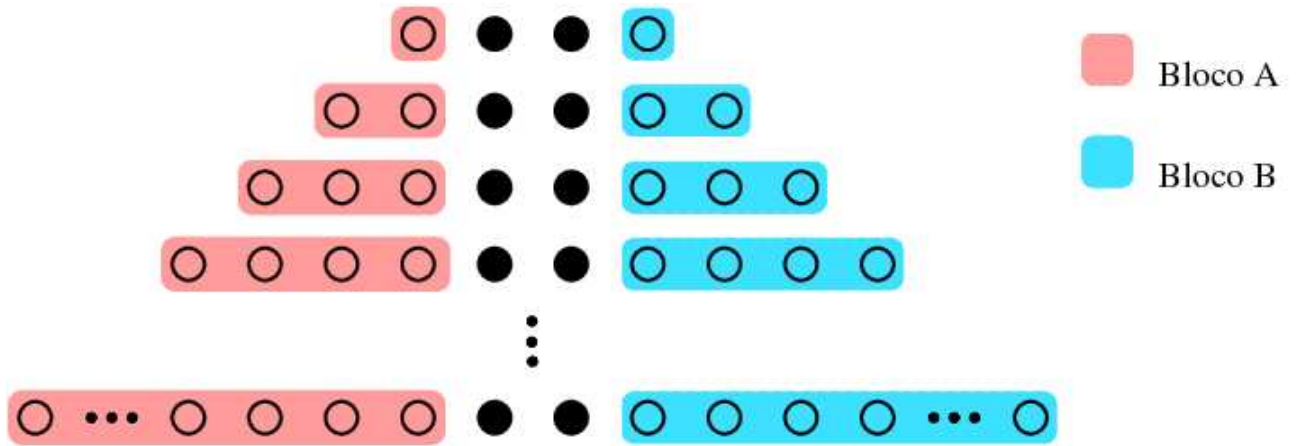


Figura 3.3: Representação esquemática do crescimento da cadeia de acordo com o algoritmo infinito.

Utilizando a técnica de diagonalização numérica de Lanczos (ver apêndice E) nós diagonalizamos a hamiltoniana do superbloco ($H_{A\bullet B}$) e determinamos o autoestado “alvo” $|\psi\rangle$, em cada iteração. Tendo o estado $|\psi\rangle$, construímos a matriz de densidade e determinamos seus autoestados, os quais serão utilizados para truncar o espaço de Hilbert. A seguir, apresentamos o algoritmo infinito do DMRG.

Algoritmo infinito do DMRG

1. A cadeia inicial consiste do bloco A , do bloco B e por dois sítios. Cada bloco contém usualmente um sítio. A estrutura do superbloco é sempre da forma $A \bullet \bullet B$.
2. Construa a hamiltoniana do superbloco $H_{A \bullet \bullet B}$, conforme a equação (3.2).
3. Usando um método de diagonalização numérica, tal como o método de Lanczos, diagonalize a hamiltoniana para encontrar o estado alvo $|\psi\rangle$. O estado $|\psi\rangle$ é usualmente o estado fundamental.
4. Construa a matriz de densidade reduzida $\rho_{A \bullet}$ [ver equação (3.11)].
5. Diagonalize $\rho_{A \bullet}$ para encontrar o conjunto dos m autoestados de maiores autovalores $\{|u_\alpha\rangle\}$.
6. Construa as matrizes ${}^iO^e$ e ${}^iO^d$ colocando os m autoestados de $\rho_{A \bullet}$ com maiores autovalores em suas linhas.
7. Construa os operadores ${}^iS_d^\alpha$ e ${}^iS_e^\alpha$ [veja as equações (3.5) e (3.6)].
8. Construa a nova hamiltoniana do bloco A usando como base os m estados retidos, isto é, ${}^{i+1}H_A = {}^iO^e ({}^iH_{A \bullet})^i O^{e\dagger}$. Havendo reflexão ${}^{i+1}H_A = {}^{i+1}H_B$.
9. Faça a transformação de base também nos operadores ${}^iS_d^\alpha$ e ${}^iS_e^\alpha$ [veja as equações (3.5) e (3.6)].
10. Vá para passo 2.

Uma vez que o tamanho da cadeia é aumentado em dois sítios a cada iteração, a energia do estado fundamental por sítio e_0 é calculada a cada passo da seguinte forma:

$$e_0 = \frac{E(L+2) - E(L)}{2}. \quad (3.12)$$

Na medida que o superbloco fica grande o suficiente para representar um sistema no limite termodinâmico, a energia do estado fundamental por sítio converge para um valor constante e_∞ ⁶. O resultado exato da energia por sítio para a cadeia infinita de Heisenberg com spin- $\frac{1}{2}$ foi calculado usando o *ansatz* de Bethe [45], cujo valor é $e_\infty = \frac{1}{4} - \ln 2$. Na

⁶Surpreendentemente, com um número pequeno de estados retidos m , e_0 tem uma precisão enorme, embora $E(L+2)$ e $E(L)$ não. Aparentemente os erros nas energias $E(L+2)$ e $E(L)$ são compensados.

figura 3.4, mostramos a convergência da energia por sítio do estado fundamental em função da iteração, para diferentes números de estados retidos m . Podemos observar desta figura que o erro cometido ao calcular e_∞ , usando o DMRG, diminui na medida que o número de estados retidos aumenta.

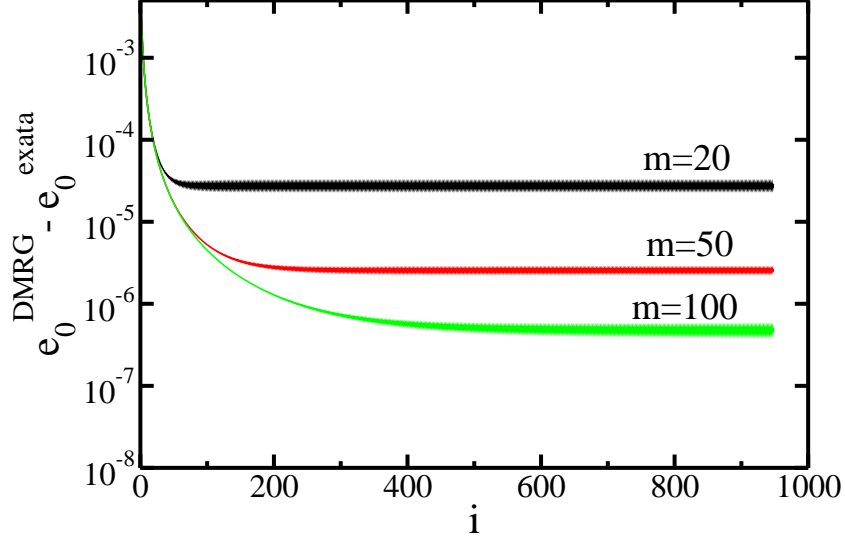


Figura 3.4: Convergência da energia do estado fundamental por sítio da cadeia de Heisenberg, com $S = \frac{1}{2}$, em função da iteração. Foram considerados diferentes valores de m (veja legenda).

O erro de truncamento do DMRG, associado com os estados descartados, é dado por:

$$\text{Erro} = 1 - \sum_{i \leq m} w_i = \sum_{i > m} w_i, \quad (3.13)$$

sendo w_i os autovalores da matriz de densidade reduzida, que supomos estarem em ordem decrescente, e ainda, usamos que $\sum_i w_i = 1$ (ver apêndice C). Vale relembrar que o sucesso do DMRG reside no fato de que é necessário um número consideravelmente pequeno de estados retidos m , em geral, poucas centenas de estados, para descrever a física relevante no sistema.

Um detalhe importante de ser ressaltado é o fato de que cadeias que apresentam gap de spin finito necessitam de menos estados retidos para descrevê-las do que cadeias que apresentam gap de spin nulo. Antes de explicar o motivo desta diferença, vamos primeiramente definir a entropia de emaranhamento do sistema ($S_{A\bullet}$). Qualitativamente a entropia de emaranhamento do sistema está vinculada com a troca de informação entre o sistema e o reservatório. $S_{A\bullet}$ é definida como:

$$S_{A\bullet} = -\text{Tr}(\rho_{A\bullet} \log_2 \rho_{A\bullet}) = -\sum_i w_i \log_2 w_i. \quad (3.14)$$

Esta entropia é também conhecida como entropia de von Neumann. Vale salientar que a soma na equação acima é feita somente nos autovalores não nulos da matriz de densidade. Podemos notar que quanto maior o número de autoestados da matriz densidade reduzida com autovalores não nulos,⁷ maior é a entropia $S_{A\bullet}$, que atinge seu valor máximo quando todos os autovalores de $\rho_{A\bullet}$ são iguais. Se o estado é não emaranhado, isto é, o estado $|\psi\rangle$ pode ser escrito como um estado produto,⁸ é fácil ver que $S_{A\bullet} = 0$. É bem conhecido que para sistemas quase-unidimensionais a entropia de um sistema bipartido, com subsistemas de tamanhos ℓ e $L - \ell$, respectivamente, comporta-se de maneira distinta se o sistema é crítico ou não.⁹ Para sistemas críticos (e invariantes conformes) $S_{A\bullet} \sim \log_2 \ell$, enquanto que para sistemas não-críticos $S_{A\bullet} \sim \log_2 \frac{1}{\Delta}$ [86–91]. Desse modo, estados que descrevem sistemas com gap de spin nulo possuem mais estados da decomposição de Schmidt do que estados de sistemas com gap de spin finito. Logo, se estamos considerando m estados retidos para estudar uma cadeia de gap de spin nulo (finito) estaremos descartando mais (menos) estados do conjunto de estados que descreve o estado “alvo”, no qual estamos interessados.

3.2.2 Algoritmo finito

No algoritmo finito estamos interessados em estudar cadeias de tamanho finito L . Assim como no algoritmo infinito, o ponto inicial do algoritmo finito é começar o processo iterativo com uma cadeia pequena, usualmente a menor possível ($L = 4$). O processo de crescimento do sistema é feito da maneira discutida anteriormente. Quando o sistema alcança o tamanho desejado L , temos $\frac{L}{2}$ sítios no sistema ($A\bullet$) e $\frac{L}{2}$ sítios no reservatório ($\bullet B$). A partir deste ponto, é feito uma varredura conforme descrevemos a seguir.

A *primeira parte* da varredura, da esquerda para a direita, consiste em crescer o tamanho do sistema e diminuir o do reservatório (veja figura 3.5). Para tanto, adicionamos um sítio no sistema e diminuímos um sítio no reservatório. Esse processo é feito até que o reservatório tenha somente dois sítios (o sistema possui $L - 2$ sítios no final desta etapa). Na figura 3.5, fazemos uma representação esquemática da varredura. Note que durante a varredura o superbloco sempre possui L sítios. Podemos ver que os blocos do lado direito (reservatórios) são análogos aos blocos construídos no algoritmo infinito. Assim, é conveniente guardar os operadores que descrevem os blocos (hamiltonianas e operadores de borda) durante o processo de crescimento do sistema para que eles sejam usados na primeira parte da varredura do processo iterativo. É importante também salvar esses operadores construídos na primeira

⁷O número de autoestados da matriz de densidade reduzida com autovalores não nulos é equivalente ao número de estados da decomposição de Schmidt (veja apêndice D).

⁸Se o estado é não emaranhado a matriz de densidade reduzida tem somente um autovalor não nulo.

⁹Um sistema é dito crítico se ele apresenta um gap de spin nulo ($\Delta_S = 0$).

parte da varredura, visto que eles serão úteis no processo iterativo da segunda parte da varredura, como apresentaremos a seguir.

A partir de agora, é feita a *segunda parte* da varredura, da direita para a esquerda, iniciando o sistema com três sítios e o reservatório com $L-3$ sítios. O sistema é então crescido, adicionando um sítio a ele a cada passo, e diminuindo um sítio do reservatório a cada passo até que o sistema e o reservatório tenham o mesmo tamanho, isto é, ambos tenham $\frac{L}{2}$ sítios¹⁰ (veja figura 3.5). Vale salientar que os operadores usados para representar o reservatório são aqueles salvos durante a primeira parte da varredura. É importante ressaltar que consideramos aqui que uma iteração é composta pelo conjunto da primeira e da segunda parte da varredura. O número de estados retidos é aumentado progressivamente a cada iteração,¹¹ veja por exemplo a referência [92]. A seguir apresentamos um algoritmo do DMRG para sistema finito.

Sistema infinito

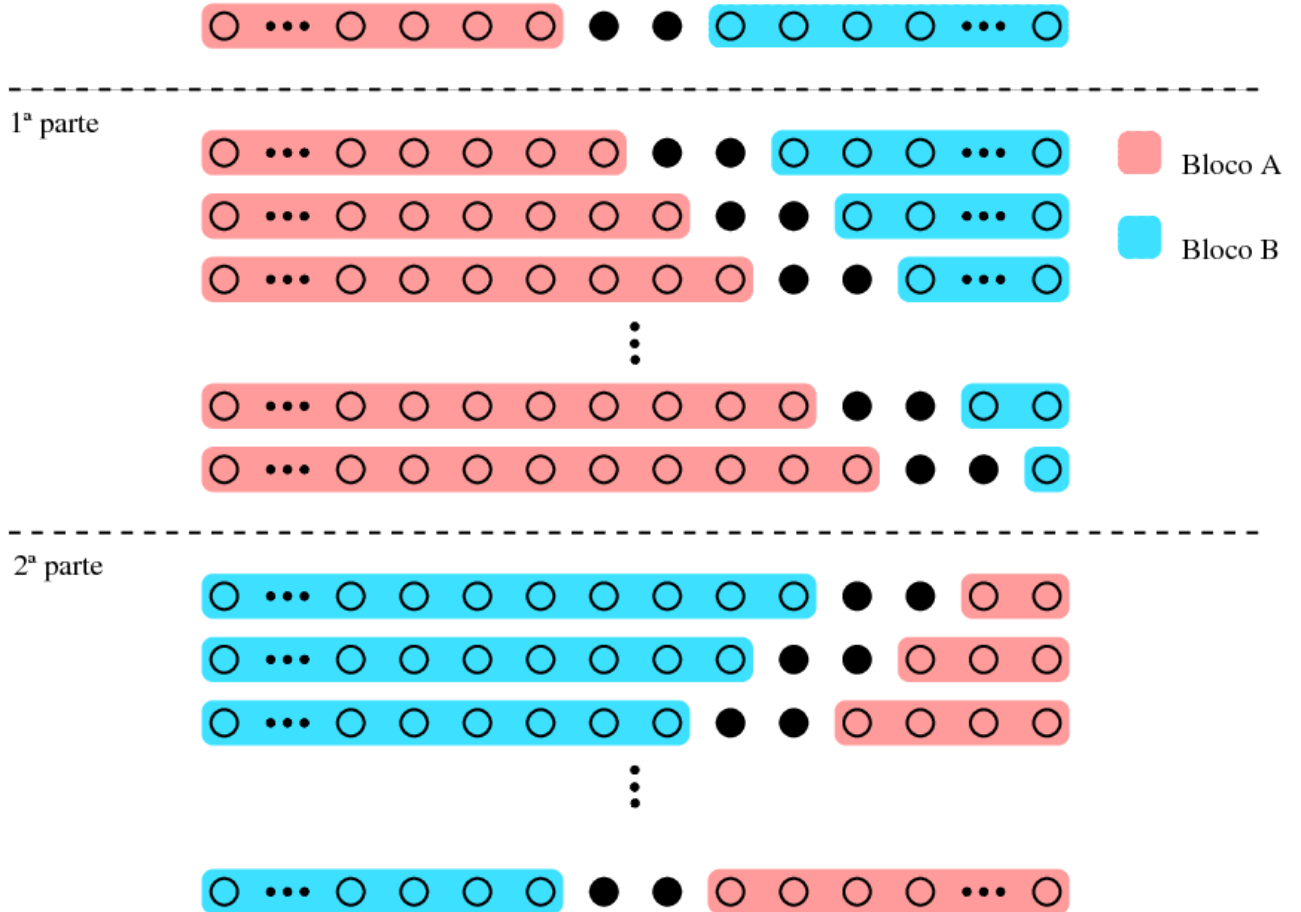


Figura 3.5: Representação esquemática da varredura, no algoritmo finito.

¹⁰É nesta configuração simétrica que em geral são feitas as medidas.

¹¹Em alguns casos é conveniente fazer duas ou três iterações para um mesmo número de estados retidos.

Algoritmo finito do DMRG

1. Inicie com uma cadeia pequena que possa ser diagonalizada exatamente. Usualmente começamos com uma cadeia de tamanho $L = 4$. Utilizando o algoritmo infinito, cresça o sistema até que o tamanho L desejado seja alcançado¹² (veja seção 3.2.1). Rotule os blocos pelo seu tamanho i ($i = 1, 2, \dots, \frac{L}{2} - 1$). A cada iteração armazene a hamiltoniana do bloco do sistema (iH_A), assim como os operadores de borda ${}^iS_d^\alpha$ e ${}^iS_e^\alpha$.
2. *Início da primeira parte da varredura:* Faça $i = \frac{L}{2}$ para o bloco do sistema. O bloco refletido (bloco do reservatório) terá tamanho $\frac{L}{2} - 2$. Note que a hamiltoniana do bloco refletido, assim como os operadores de borda do reservatório foram armazenados durante o processo iterativo de crescimento da cadeia.
3. Faça os passos 2 a 10 do algoritmo de sistema infinito previamente apresentado (veja página 20).
4. Armazene a hamiltoniana do bloco A , iH_A , e os operadores de borda.
5. Faça $i \rightarrow i + 1$, e volte para o passo 3 até que o tamanho i seja igual a $L - 3$. Note que o bloco refletido terá tamanho $L - i - 2$ e os operadores necessários para descrever o reservatório foram armazenados durante a execução do passo 1.
6. *Início da segunda parte da varredura:* Inicie com um bloco do sistema de tamanho $i = 2$, e o bloco do reservatório de tamanho $L - 4$.
7. Faça os passos 2 a 10 do algoritmo de sistema infinito.
8. Armazene o novo bloco iH_A , substituindo o antigo.
9. Faça $i \rightarrow i + 1$, e volte para o passo 7 até que o tamanho i seja igual a $\frac{L}{2} - 1$. Assim como no primeiro passo da varredura os operadores necessários para a descrição do reservatório já foram armazenados anteriormente.

Para um sistema unidimensional é necessário, geralmente, poucas varreduras para que tenhamos uma grande precisão na energia do superbloco. No algoritmo do sistema finito do DMRG, anteriormente citado, apresentamos somente uma varredura. Dessa forma, para fazermos mais varreduras devemos voltar ao passo 2 assim que o tamanho $\frac{L}{2} - 1$ seja alcançado no passo 9. Neste trabalho, nós apresentamos o DMRG para sistemas com condições de contorno abertas, mas devemos ressaltar que é possível estudar sistemas com condições

¹²O tamanho L é alcançado quando fazemos $(\frac{L}{2} - 1)$ iterações do algoritmo de sistema infinito.

periódicas de contorno usando o DMRG. Para tanto, devemos levar em consideração a interação dos spins localizados nas extremidades dos blocos A e B na construção da hamiltoniana do superbloco.

3.2.3 Comparação entre o DMRG e o RG

O uso da matriz de densidade para a escolha dos estados que desejamos reter é bastante natural. Para um bloco *isolado*, a temperatura finita, a probabilidade de que o sistema esteja em um estado $|\alpha\rangle$, com energia E_α , é proporcional ao peso de Boltzmann $e^{-\beta E_\alpha}$. O peso de Boltzmann é um autovalor da matriz de densidade $\rho_{A\bullet} = e^{-\beta H_{A\bullet}}$. Note que os autoestados do sistema ($H_{A\bullet}$) são também autoestados da matriz de densidade. Dessa forma, os estados de menor energia correspondem aos estados mais prováveis (com maior peso de Boltzmann). Podemos ver então que o grupo de renormalização padrão escolhe os m estados mais prováveis, dado o pressuposto que o sistema está *isolado*. No entanto, no caso de sistemas quânticos de rede o sistema não está isolado, portanto a matriz de densidade do sistema, geralmente, não é dada por $e^{-\beta H_{A\bullet}}$.¹³ Consequentemente, em geral os autoestados de $H_{A\bullet}$ não são autoestados de $\rho_{A\bullet}$. Dessa forma, os estados mais prováveis, quando o sistema não é isolado, geralmente, não são os estados de menor energia, e sim os estados de maior autovalor da matriz de densidade.

A fim de mostrar a eficiência do DMRG em relação ao RG, apresentamos na figura 3.6 a diferença entre a energia exata do estado fundamental da cadeia de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ com $L = 28$ (E_{exato}), calculada através do método de diagonalização exata, e a energia calculada através do RG [figura 3.6(a)] e do DMRG [figura 3.6(b)] em função do número de estados retidos m . Conforme observamos nesta figura, usando apenas 90 estados retidos, o DMRG encontra a energia exata (com a precisão de 10^{-12})¹⁴ para a cadeia de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ com 28 sítios, com apenas uma varredura, enquanto o RG encontra a energia com uma precisão de 10^{-4} . Vemos que o erro cometido pelo RG é várias ordens de magnitude maior que o DMRG. Vale ressaltar que o tamanho do espaço de Hilbert da cadeia com $L = 28$, usando a simetria $U(1)$, associada com o fato de que a magnetização total (S_{TOTAL}^z) é conservada, é aproximadamente 40×10^6 . Contudo, no DMRG retendo apenas 90 estados, o superbloco possui dimensão $\sim 2 \times 10^3$.

¹³A matriz de densidade do sistema é agora dada pela matriz de densidade reduzida definida como $\rho_{A\bullet} = \text{tr}_{\bullet B} \rho$.

¹⁴Podemos observar na figura 3.6(b) que para $m > 90$ a acurácia da energia não é modificada, pois chegamos na precisão do computador (10^{-12}).

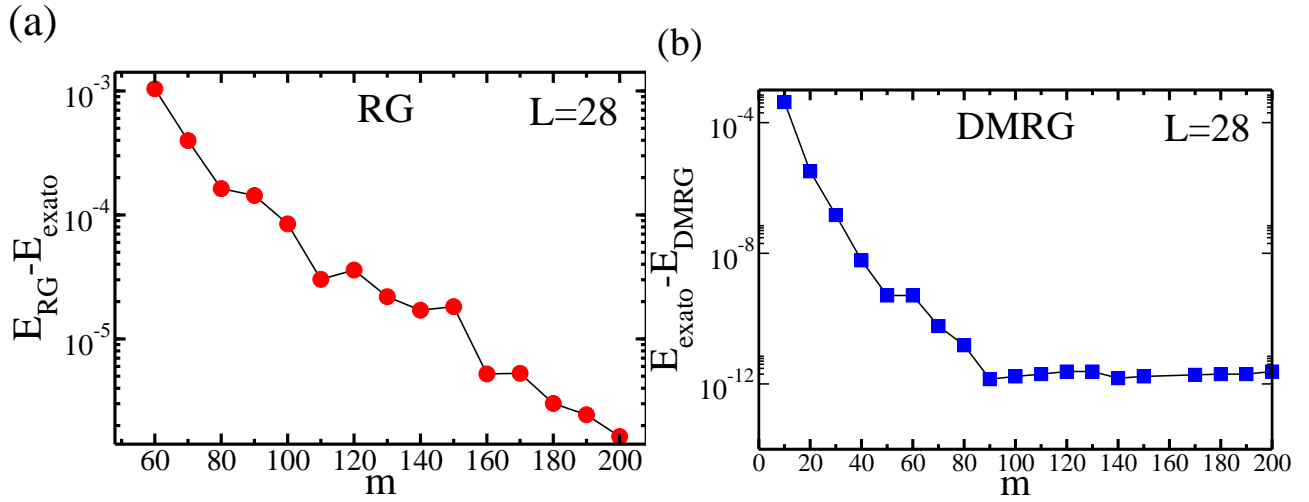


Figura 3.6: Diferença entre a energia do estado fundamental exata e a energia do estado fundamental calculada através do (a) RG e (b) DMRG para uma cadeia de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ e $L = 28$. A energia do estado fundamental exata foi calculada usando o método de Lanczos.

3.2.4 DMRG para sistemas quase-unidimensionais

Sistemas quase-unidimensionais são sistemas de grande interesse na física da matéria condensada. O DMRG apresenta resultados muito menos precisos em sistemas com mais de uma dimensão do que em sistemas 1D. Todavia, a carência de aproximações alternativas torna o DMRG uma das técnicas mais poderosas no estudo de sistemas quase-unidimensionais. Vale ressaltar que existem estudos de sistemas bidimensionais usando o DMRG [93–95]. A dificuldade de estudar sistemas 2D reside no fato de que o número de estados retidos (m) deve crescer exponencialmente com a largura do sistema para que uma boa precisão na energia seja obtida [93].

O algoritmo para sistemas quase-unidimensionais que consideramos consiste em mapear o sistema original em um sistema unidimensional com interações de longo alcance. Na figura 3.7, apresentamos uma representação esquemática de uma escada de tamanho 6×7 do ponto de vista do DMRG.¹⁵

Nas escadas de Heisenberg, o acoplamento ao longo dos degraus é comparável ao acoplamento ao longo da cadeia; portanto, quando construímos a hamiltoniana dos blocos do DMRG, devemos nos atentar em considerar a interação entre os spins ao longo dos degraus. Em geral, o processo iterativo é análogo ao do sistema unidimensional. Para ilustrar o crescimento da cadeia em um sistema de escada, apresentamos na figura 3.8 o processo de

¹⁵As linhas pontilhadas na figura 3.7 representam as interações de longo alcance no mapeamento das escadas de Heisenberg em um sistema unidimensional.

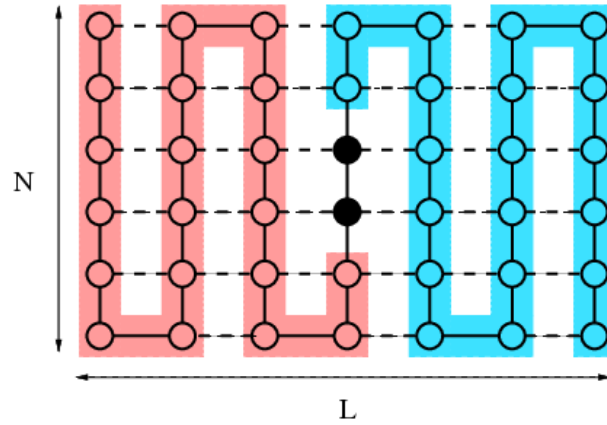


Figura 3.7: Representação esquemática de um sistema de tamanho 6×7 do ponto de vista do DMRG.

crescimento da cadeia para uma escada de duas pernas e três pernas.

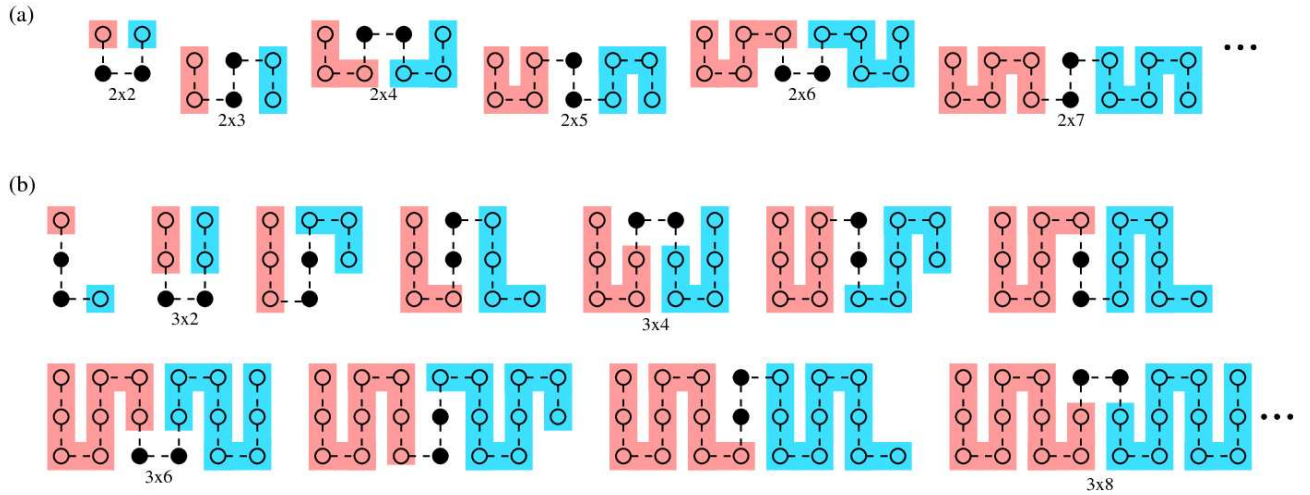


Figura 3.8: Representação esquemática do crescimento da cadeia para uma escada de (a) duas pernas e (b) três pernas.

Observando a figura 3.8, podemos notar que o crescimento da cadeia para as escadas de Heisenberg de duas pernas apresentam duas disposições diferentes dos sítios “reais” (círculos preenchidos) na rede, enquanto que para as escadas de três pernas temos somente uma disposição. Em geral, escadas com um número par de pernas exibem duas disposições diferentes e escadas com um número ímpar de pernas apresentam somente uma disposição. Assim, para o cálculo da energia do estado fundamental por sítio (e_0) devemos considerar somente sistemas com configurações equivalentes. Logo, é fácil ver que, a energia e_0 para pernas pares e ímpares é dada por:

$$e_0 = \frac{E[N \times (L + 2)] - E(N \times L)}{2N}. \quad (3.15)$$

O processo de varredura para o algoritmo de sistema finito também é análogo ao algoritmo para sistemas 1D. Na figura 3.9, mostramos o processo de varredura de uma escada de Heisenberg de tamanho 3×4 .

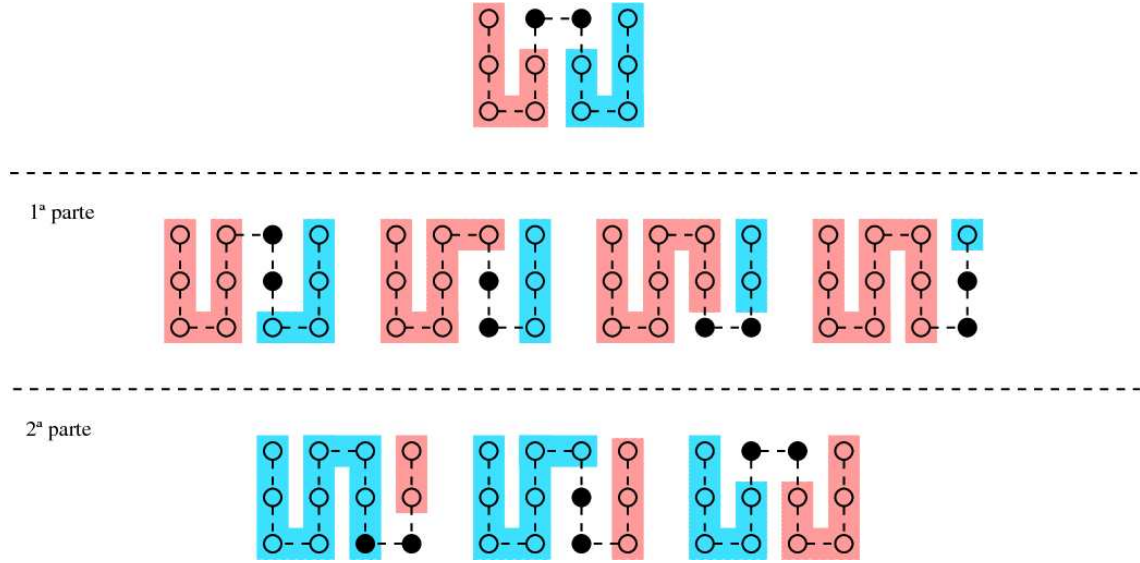


Figura 3.9: Representação esquemática do processo de varredura do algoritmo de sistema finito para uma escada de Heisenberg de tamanho 3×4 .

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo, apresentamos nossas estimativas da energia do estado fundamental por sítio (e_∞) e do gap de spin (Δ_S), no limite termodinâmico, das escadas de Heisenberg de N pernas com spin- S , usando o DMRG. Através do valor de e_∞ das escadas, estimamos também a energia do estado fundamental, no limite termodinâmico, do modelo de Heisenberg bidimensional. A fim de estimar e_∞ e Δ_S com precisão, calculamos tais valores para diferentes números de estados retidos m . Para o cálculo de e_∞ o maior valor de m considerado foi 1200 estados, enquanto que para o gap de spin foi 3900 estados.

4.1 Spin- $\frac{1}{2}$

Os resultados da energia do estado fundamental por sítio, no limite termodinâmico (e_∞), assim como do gap de spin (Δ_S) das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ já são bem conhecidos. Abaixo reproduziremos esses resultados, o que mostra que nosso código/programa¹ está correto.

Energia do estado fundamental por sítio: e_∞

Usando o algoritmo de sistema infinito do DMRG, estimamos e_∞ das escadas de Heisenberg com até seis pernas ($N = 6$), assim como para o modelo bidimensional ($N \rightarrow \infty$). Os resultados encontrados são mostrados na tabela 4.1. Nesta tabela também apresentamos alguns resultados bem conhecidos, como o do modelo unidimensional, cujo valor exato (calculado via *ansatz* de Bethe) é dado por $e_\infty = \frac{1}{4} - \ln 2 = -0,443147180559$ [45], além de estimativas de Monte Carlo (MC) para $2 \leq N \leq 6$ [74], bem como para o modelo de Heisen-

¹Desenvolvemos um programa geral para as escadas de Heisenberg. O “input” do programa é N , S , L e m .

Tabela 4.1: Estimativas da energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ com até seis pernas e do modelo de Heisenberg 2D. Valores obtidos por *ansatz* de Bethe [45] e MC [74, 96] também são apresentados (veja texto).

N	e_∞	Valores de referência
1	-0,4431471	exato: -0,443147180559
2	-0,57804314	MC: -0,5780(2)
3	-0,60053	MC: -0,6006(3)
4	-0,61856	MC: -0,6187(3)
5	-0,62776	MC: -0,6278(4)
6	-0,6345	MC: -0,635(1)
∞	-0,6685	MC: -0,66931

berg 2D [96]. Conforme vemos, nossos resultados estão em pleno acordo com os resultados encontrados na literatura [45, 74, 96].

Na figura 4.1, mostramos e_∞ em função de $\frac{1}{N}$. A fim de estimar e_∞^{2D} , do modelo de Heisenberg bidimensional ($N \rightarrow \infty$), supomos que $e_\infty(N)$ comporta-se como:

$$e_\infty(N) = e_\infty^{2D} + \frac{A}{N}. \quad (4.1)$$

Ajustando os dados reportados na tabela 4.1 com a equação (4.1), estimamos $e_\infty^{2D} = -0,6685$. Como mencionado anteriormente, o valor de e_∞^{2D} , para o caso de spin- $\frac{1}{2}$, já é bem conhecido na literatura. U. -J. Wiese e H. P. Ping [96], usando a técnica de Monte Carlo, encontraram que $e_\infty^{2D} = -0,66931$.

Gap de spin: Δ_s

Na figura 4.2, apresentamos o gap de spin Δ_s *vs.* $\frac{1}{(L-1)}$ das escadas de Heisenberg com até cinco pernas. O gap de spin é calculado considerando a diferença de energia entre o estado fundamental (o estado fundamental se encontra no setor $\mathcal{S}^z = 0$) e o primeiro estado excitado (que corresponde ao estado fundamental do setor $\mathcal{S}^z = 1$).

É esperado que o modelo de Heisenberg no ponto isotrópico apresente correções logarítmicas na energia [97, 98]. A fim de estimar o gap de spin, no limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$), das escadas de Heisenberg, considerando as correções logarítmicas,² usamos a seguinte equação para ajustar nossos dados [97, 98]:

²Para vermos os efeitos da correções logarítmicas claramente, deveríamos considerar redes com tamanho $L = 10, 100, 1000, \dots$.

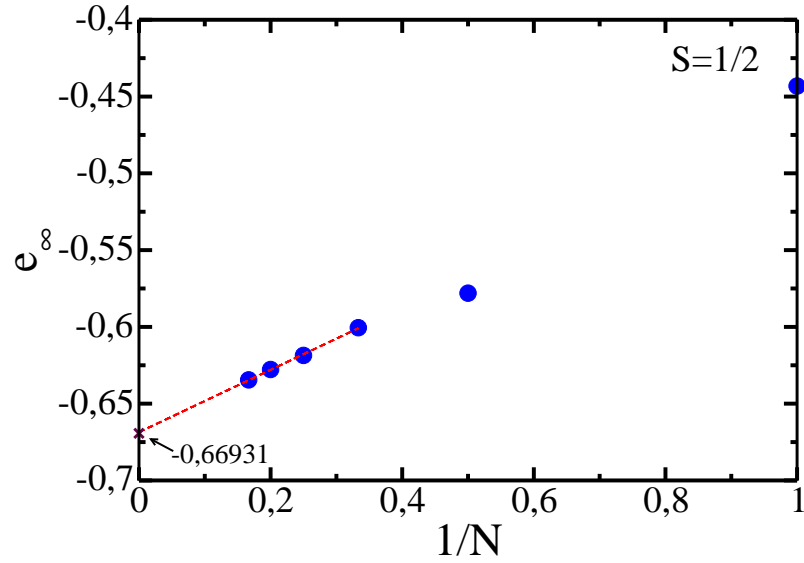


Figura 4.1: e_∞ vs. $\frac{1}{N}$. Os símbolos são os dados numéricos reportados na tabela 4.1. A linha pontilhada é um ajuste destes dados com a equação (4.1). Os pontos que não estão conectados pela linha pontilhada não foram considerados no ajuste.

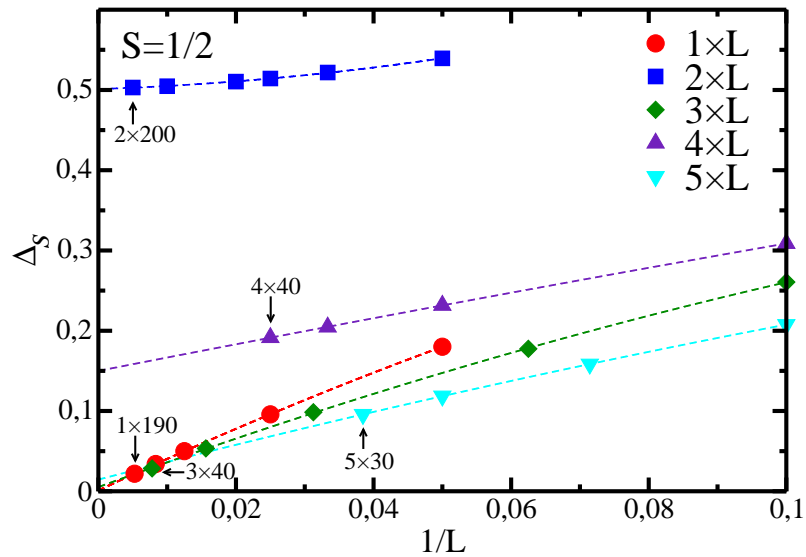


Figura 4.2: Δ_S vs. $\frac{1}{(L-1)}$ para as escadas de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas pontilhadas são os ajustes dos nossos dados com a equação (4.2).

$$\Delta_S = \Delta_S^\infty + \frac{A}{L-1} + \frac{B}{(L-1)\ln(L-1)} + \dots \quad (4.2)$$

As linhas pontilhadas na figura 4.2 representam os ajustes dos nossos resultados com a equação (4.2). Na tabela 4.2, reportamos nossas estimativas do gap de spin (Δ_S^∞) obtidas através do ajuste.

Tabela 4.2: Estimativas do gap de spin $\Delta_S^\infty(N)$ das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ com até seis pernas.

N	Δ_S^∞
1	$5,85 \times 10^{-7}$
2	0,5019
3	0,005
4	0,149
5	0,013
6	0,049

Podemos notar, pela figura 4.2, que de fato existe um comportamento distinto para o gap de spin das escadas de Heisenberg dependendo da paridade do número de pernas. O gap de spin tende a zero para escadas com um número ímpar de pernas, enquanto que para um número par de pernas o gap tende para um valor constante não nulo. Resultado este esperado pela conjectura Haldane-Sierra [1–3]. Vale mencionar que White *et al.* [73], usando o DMRG, encontraram que o gap de spin é muito próximo de zero para as escadas com uma perna e três pernas, enquanto que as escadas de duas pernas e quatro pernas possuem um gap de spin igual a $\Delta_S^\infty = 0,504$ e $\Delta_S^\infty = 0,19$, respectivamente. No mesmo contexto, Frischmuth, Ammom e Troyer, através do cálculo da susceptibilidade magnética, usando a técnica de Monte Carlo, encontraram que o gap spin para as escadas de duas, quatro e seis pernas são, respectivamente, $\Delta_S^\infty = 0,17$, $\Delta_S^\infty = 0,51(1)$ e $\Delta_S^\infty = 0,05$ [74]. Note que os resultados obtidos por nós (ver tabela 4.2) estão em pleno acordo com os resultados encontrados na literatura.

4.2 Spin-1

Para o caso de spin-1, as estimativas do valor da energia do estado fundamental por sítio (e_∞) e do gap de spin (Δ_S) da escada de Heisenberg de uma perna (modelo unidimensional) também são bem conhecidas. A seguir, apresentamos nossas estimativas de e_∞ , tanto das escadas de Heisenberg com até seis pernas, quanto do modelo de Heisenberg 2D. Apresentaremos também nossas estimativas do gap de spin.

Tabela 4.3: Estimativas da energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de spin-1 com até seis pernas e do modelo de Heisenberg 2D.

N	e_∞
1	-1,4014840389
2	-1,8783727
3	-2,0204
4	-2,095
5	-2,141
6	-2,168
∞	-2,317

Energia do estado fundamental por sítio: e_∞

Usando o DMRG, White e Huse [50] estimaram e_∞ do modelo de Heisenberg unidimensional. O valor encontrado por eles foi $e_\infty = -1,401484038971(4)$. Estimativas similares também são encontradas na literatura [48–51]. Na tabela 4.3, apresentamos nossas estimativas de e_∞ das escadas de N pernas. Conforme vemos nesta tabela, o caso de $N = 1$ está em pleno acordo com os resultados encontrados na literatura. Vale mencionar que estimativas de e_∞ e Δ_S para as escadas de spin com $S > \frac{1}{2}$ e com mais de uma perna não são encontrados na literatura, até onde sabemos. Na figura 4.3, apresentamos o gráfico de e_∞ em função de $\frac{1}{N}$. Ajustando nossos dados com a equação (4.1), estimamos o valor de e_∞ para o modelo de Heisenberg bidimensional. O valor obtido de e_∞^{2D} foi -2,317. Vale ressaltar que também não encontramos na literatura a energia do estado fundamental no limite termodinâmico do modelo de Heisenberg 2D para $S > \frac{1}{2}$.

Gap de spin: Δ_s

Em contraste aos sistemas que exibem um *contínuo* de estados acima do estado fundamental, é esperado que as escadas de Heisenberg de spin inteiro apresentem um gap de energia entre o estado fundamental e os primeiros estados excitados. A existência do gap de spin para a cadeia de Heisenberg de spin-1 foi confirmada experimentalmente por Renard, Verdaguer e Regnault através de medidas de susceptibilidade magnética no composto $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$, também conhecido como NENP [36]. Foi encontrado que o valor do gap de spin do NENP é 0,42 [36].

A física de baixas energias das cadeias de Heisenberg são bem próximas das hamiltonianas VBS [99, 100](do inglês *Valence-Bond Solid*). A partir das hamiltonianas VBS, é conhecido que o estado fundamental da cadeia, com condições de contorno abertas e de spin inteiro S ,

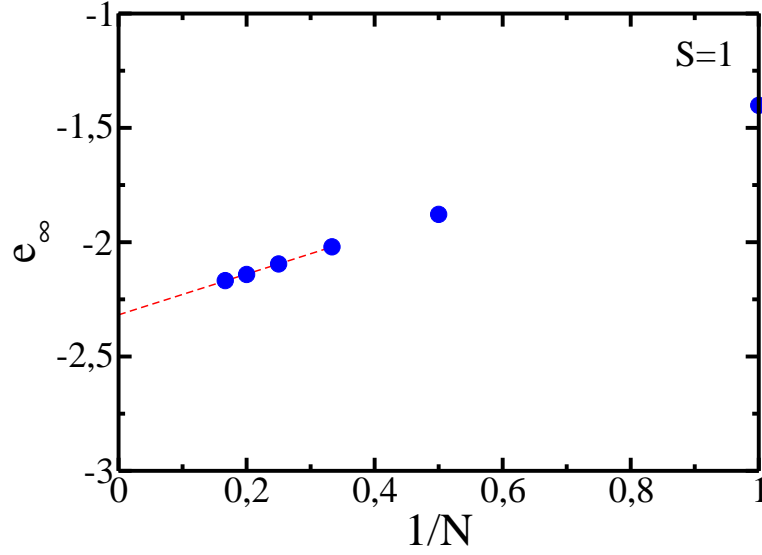


Figura 4.3: e_∞ vs. $\frac{1}{N}$. Os símbolos são os dados numéricos reportados na tabela 4.3. A linha pontilhada é um ajuste destes dados com a equação (4.1). Os pontos que não estão conectados pela linha pontilhada não foram considerados no ajuste.

possui $(S+1)^2$ estados degenerados. Isso acontece porque as bordas da cadeia comportam-se como spins- $\frac{S}{2}$ livres [59, 99, 100]. Desse modo, para spin-1 temos 4 estados degenerados, no limite termodinâmico. É importante acentuar aqui que o fato do estado fundamental ser degenerado não significa que o gap de spin é nulo, pois ainda assim existe um gap de energia entre o contínuo de estados e o estado fundamental. Logo, se estamos usando a simetria $U(1)$ (simetria com a magnetização total), devemos calcular o gap de spin considerando a diferença de energia entre o estado fundamental (estado fundamental do setor $\mathcal{S}^z = 0$), e o quinto estado excitado (que corresponde ao estado fundamental do setor $\mathcal{S}^z = 2$).

Para o caso das *escadas* de Heisenberg de spin inteiro e com condições de contorno abertas, nós confirmamos numericamente que há uma dependência entre o número de degenerescências do estado fundamental (no limite termodinâmico) e o número de pernas da escada. Nós encontramos que o estado fundamental é não degenerado quando o número de pernas da escada é par, enquanto que o estado fundamental de escadas com pernas ímpares possui $(S+1)^2$ degenerescências. Possivelmente, o estado fundamental das escadas de Heisenberg também podem ser descritos por estados VBS. Na figura 4.4(a), nós mostramos o gap de spin em função de $\frac{1}{(L-1)}$ para a escada de duas pernas e $S = 1$, considerando a diferença de energia entre o estado fundamental (EF) e o primeiro estado excitado (PEE). Podemos observar através desta figura que de fato o estado fundamental é não degenerado no limite termodinâmico. Na figura 4.4(b), mostramos Δ_S vs. $\frac{1}{(L-1)}$ para a escada de três pernas, considerando a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado

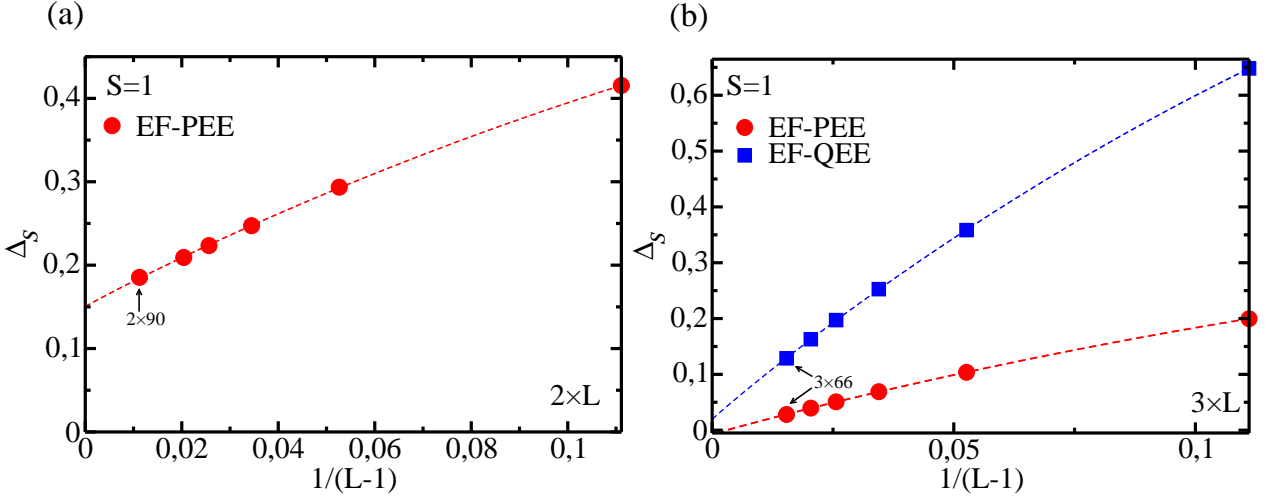


Figura 4.4: Gap de spin *vs.* $\frac{1}{(L-1)}$ da escada de Heisenberg de spin-1 com (a) duas pernas e (b) três pernas. Os pontos em vermelho (azul) é a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro (quarto) estado excitado. As linhas pontilhadas em ambos os gráficos são os ajustes dos nossos dados usando a equação (4.2). Podemos notar que para o caso de duas pernas o estado fundamental é não degenerado, enquanto que para a escada de três pernas o estado fundamental possui 4 degenerescências (veja texto).

e também a diferença de energia do estado fundamental e o quarto estado excitado (QEE). A partir desta figura, podemos notar que o estado fundamental, no limite termodinâmico, é degenerado com o primeiro estado excitado.³ Contudo, há um gap de spin, entre o estado fundamental e o quarto estado excitado.

Na figura 4.5, apresentamos nossos resultados para o gap de spin das escadas de spin-1 com até três pernas. Ajustando nossos dados com a equação (4.2), estimamos os valores do gap de spin no limite termodinâmico (Δ_S^∞). Essas estimativas são reportadas na tabela 4.4.

Vários pesquisadores usaram diferentes técnicas, tais como Monte Carlo [46], DMRG [48–50] e diagonalização exata [47, 51], para determinar o valor do gap de spin da cadeia de Heisenberg de spin-1. White e Huse [50], usando o DMRG, encontraram que o gap de spin para a cadeia de Heisenberg é $\Delta_S^\infty = 0,41050(2)$. Estimativas similares são encontradas na literatura [46–49, 51]. Observe que nossa estimativa de Δ_S^∞ para a escada de Heisenberg com uma perna (ver tabela 4.4) encontra-se em pleno acordo com os resultados encontrados na literatura.

³Devido a hamiltoniana possuir simetria com S^2 , podemos afirmar, mesmo sem cálculos, que o estado fundamental é também degenerado com o segundo estado excitado e com o terceiro estado excitado.

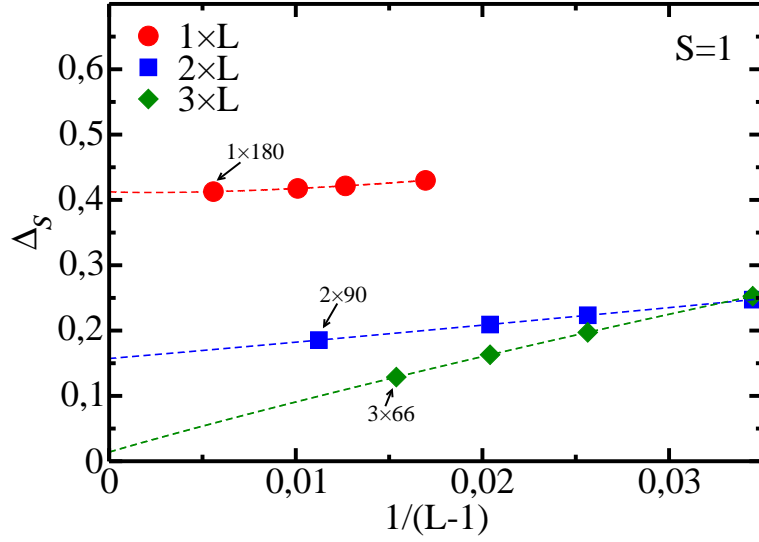


Figura 4.5: Δ_S vs. $\frac{1}{(L-1)}$ para as escadas de Heisenberg de spin-1 com até três pernas. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas pontilhadas são os ajustes dos nossos dados com a equação (4.2).

Tabela 4.4: Estimativas do gap de spin $\Delta_S^\infty(N)$ das escadas de Heisenberg de spin-1 com até três pernas.

N	Δ_S^∞
1	0,412494
2	0,29843
3	0,013

4.3 Spin- $\frac{3}{2}$

Energia do estado fundamental por sítio: e_∞

Na tabela 4.5, apresentamos nossas estimativas da energia do estado fundamental por sítio, no limite termodinâmico, das escadas de Heisenberg com até seis pernas, assim como do modelo de Heisenberg 2D, usando o algoritmo infinito do DMRG. A estimativa de e_∞ para a cadeia de Heisenberg de spin- $\frac{3}{2}$ foi estabelecida em alguns trabalhos. G. Sun e F. Pu, usando a técnica de Monte Carlo, encontraram o valor de $e_\infty = -2,8248$ [53]. No mesmo contexto Hallberg *et al.* [52], usando o DMRG, encontraram que o valor de e_∞ é $-2,82833$. Podemos notar que nossa estimativa, para o caso de $N = 1$ (ver tabela 4.5), está em pleno acordo com os resultados encontrados na literatura [49, 52, 53]. Na figura 4.6, mostramos e_∞ em função de $\frac{1}{N}$. A fim de estimar o valor de e_∞ do modelo de Heisenberg 2D, ajustamos nossos dados reportados na tabela 4.5 com a equação (4.1). O valor encontrado por este

ajuste foi $e_\infty^{2D} = -4,94$.

Tabela 4.5: Estimativas da energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{3}{2}$ com até seis pernas e do modelo de Heisenberg 2D.

N	e_∞
1	-2,828336
2	-3,930066
3	-4,2718
4	-4,4468
5	-4,5546
6	-4,60
∞	-4,94

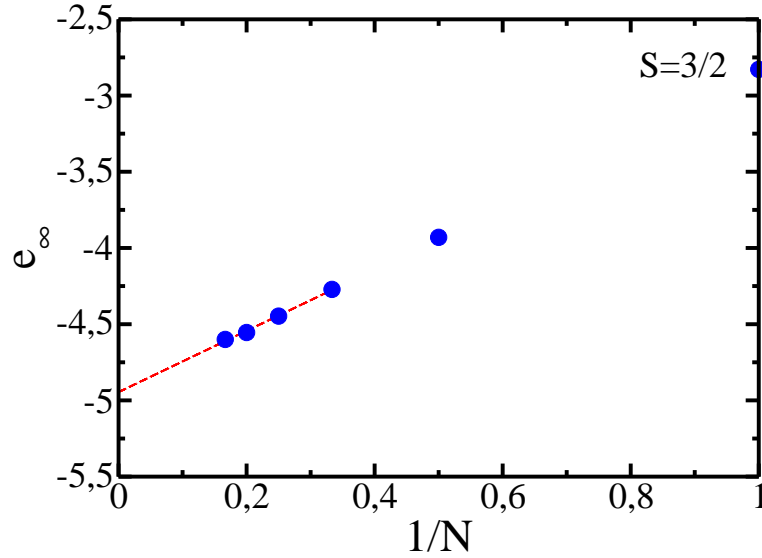


Figura 4.6: e_∞ vs. $\frac{1}{N}$. Os símbolos são os dados numéricos reportados na tabela 4.5. A linha pontilhada é um ajuste destes dados com a equação (4.1). Os pontos que não estão conectados pela linha pontilhada não foram considerados no ajuste.

Gap de spin: Δ_s

Na figura 4.7, apresentamos nossas estimativas do gap de spin em função de $\frac{1}{(L-1)}$ para as escadas de Heisenberg de spin- $\frac{3}{2}$ com até cinco pernas. Novamente, a fim de estimar o gap de spin, no limite termodinâmico, fizemos um ajuste dos nossos dados com a equação (4.2), conforme já discutido. Na tabela 4.6, reportamos os valores encontrados de Δ_s^∞ .

Podemos observar que o gap de spin das escadas de Heisenberg com pernas ímpares tende a zero, enquanto que o gap de spin para escadas com pernas pares tende a um valor finito,

como esperado pela conjectura Haldane-Sierra para spin semi-inteiro. Resultados de Qin, Ng e Su [49] suportam que a cadeia de Heisenberg tem um gap de spin nulo, no limite termodinâmico. Um resultado similar é encontrado na referência [53]. Nossas estimativas do gap de spin, para o caso de $N = 1$, está em acordo com esses resultados encontrados na literatura, conforme observamos na figura 4.7.

Tabela 4.6: Estimativas do gap de spin $\Delta_S^\infty(N)$ das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{3}{2}$ com até cinco pernas.

N	Δ_S^∞
1	-0,0001
2	0,034
3	0,0008
4	0,005
5	0,0002

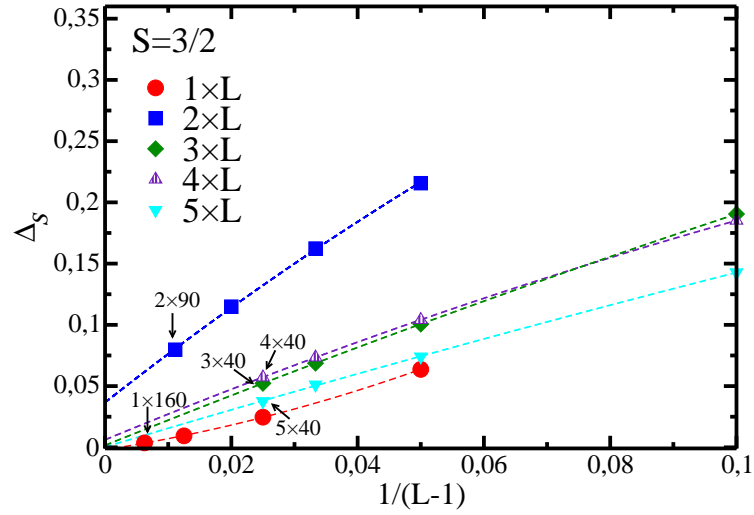


Figura 4.7: Δ_S vs. $\frac{1}{(L-1)}$ para as escadas de Heisenberg de spin- $\frac{3}{2}$. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas pontilhadas são os ajustes dos nossos dados com a equação (4.2).

Vale mencionar que através de medidas de susceptibilidade magnética nos compostos CsVCl_3 e AgCrP_2S_6 foi confirmado experimentalmente que o gap de spin para a cadeia de Heisenberg de spin- $\frac{3}{2}$ é nulo [40].

4.4 Spin-2

Algumas estimativas da energia do estado fundamental por sítio, no limite termodinâmico, assim como do gap de spin da cadeia de Heisenberg de spin-2 são conhecidas na literatura

[48, 49, 54–64, 66]. Abaixo apresentamos nossas estimativas para o caso de $N = 1$, bem como para $N > 1$, sendo estes últimos, até onde sabemos, resultados inéditos.

Energia do estado fundamental por sítio: e_∞

Utilizando o algoritmo infinito do DMRG, estimamos o valor da energia do estado fundamental por sítio para escadas de Heisenberg de spin-2 com até seis pernas. Na tabela 4.7, mostramos nossas estimativas de e_∞ . G. Sun [56], usando o método de Monte Carlo, estimou $e_\infty = -4,7545$ para a cadeia de Heisenberg de spin-2. No mesmo contexto, S. Qin, X. Wang e L. Yu encontraram $e_\infty = -4,761244(1)$, usando o DMRG [48]. Estimativas similares também são encontradas na literatura [49, 60, 62]. Na tabela 4.7, dispomos nossas estimativas de e_∞ , na qual vemos que o caso $N = 1$ está em pleno acordo com os resultados encontrados na literatura. Na figura 4.8, apresentamos e_∞ em função de $\frac{1}{N}$. A fim de estimar o valor de e_∞ do modelo de Heisenberg 2D, ajustamos os dados reportados na tabela 4.7 com a equação (4.1). O valor encontrado com este ajuste foi $e_\infty^{2D} = -8,61$.

Tabela 4.7: Estimativas da energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de spin-2 com até seis pernas e do modelo de Heisenberg 2D.

N	e_∞
1	-4,761248
2	-6,73254
3	-7,3565
4	-7,669
5	-7,867
6	-7,91
∞	-8,61

Gap de spin: Δ_s

Na figura 4.9, apresentamos nossas estimativas do gap de spin em função de $\frac{1}{(L-1)}$ para as escadas de Heisenberg de spin-2 com até quatro pernas. Assim como mencionado anteriormente, cadeias com condições de contorno abertas e spin inteiro S exibem um estado fundamental com $(S+1)^2$ degenerescências. Desse modo, para o caso de spin-2, temos que o estado fundamental da cadeia de Heisenberg, no limite termodinâmico, é 9 vezes degenerado. Logo, se estamos interessados em considerar a simetria com a magnetização total, devemos

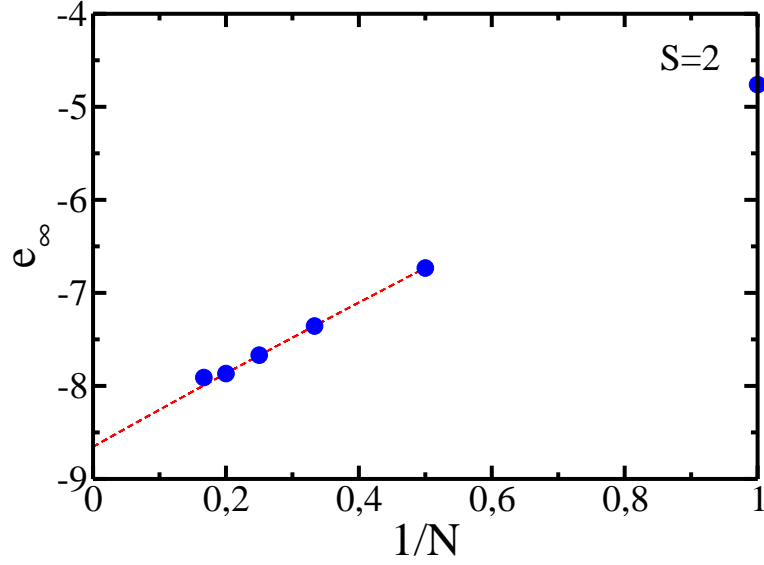


Figura 4.8: e_∞ vs. $\frac{1}{N}$. Os símbolos são os dados numéricos reportados na tabela 4.7. A linha pontilhada é um ajuste destes dados com a equação (4.1). Os pontos que não estão conectados pela linha pontilhada não foram considerados no ajuste.

calcular a diferença entre a energia do estado fundamental (estado fundamental do setor $\mathcal{S}^z = 0, 1, 2$) e a energia do décimo estado excitado (estado fundamental do setor $\mathcal{S}^z = 3$). Para o caso das escadas de Heisenberg é esperado uma dependência da degenerescência do estado fundamental, no limite termodinâmico, com o número pernas, conforme mencionado anteriormente. Escadas com pernas ímpares exibem um estado fundamental 9 vezes degenerado, enquanto que o estado fundamental de escadas com pernas pares é não degenerado.

Ajustando nossos dados com a equação (4.2), determinamos estimativas do gap de spin, no limite termodinâmico, das escadas de Heisenberg com até quatro pernas. Estas estimativas são apresentadas na tabela 4.8. Vale mencionar que o valor do gap de spin da escada de Heisenberg de uma perna (modelo unidimensional) de spin-2 foi investigado tanto experimentalmente quanto teoricamente. Entretanto, houve uma considerável divergência nos valores teóricos encontrados para o gap de spin. Na tabela 4.9, fazemos uma revisão das estimativas de $\Delta_{\mathcal{S}}^\infty$ encontradas na literatura com suas respectivas referências. Acreditamos que a discrepância das estimativas encontradas se deve às maneiras distintas usadas para extrapolar os dados do gap de spin. Atualmente, é bem aceito que o valor de $\Delta_{\mathcal{S}}^\infty$ é aproximadamente 0,08. Através de medidas de magnetização no composto $\text{MnCl}_3(\text{bipy})$, Granroth *et. al* [42], estimaram experimentalmente o valor de $\Delta_{\mathcal{S}}^\infty = 0,07 \pm 0,02$. Desse modo, vemos que nossa estimativa do gap de spin para a cadeia de Heisenberg, $\Delta_{\mathcal{S}=2}^\infty = 0,086$, está em acordo com o esperado.

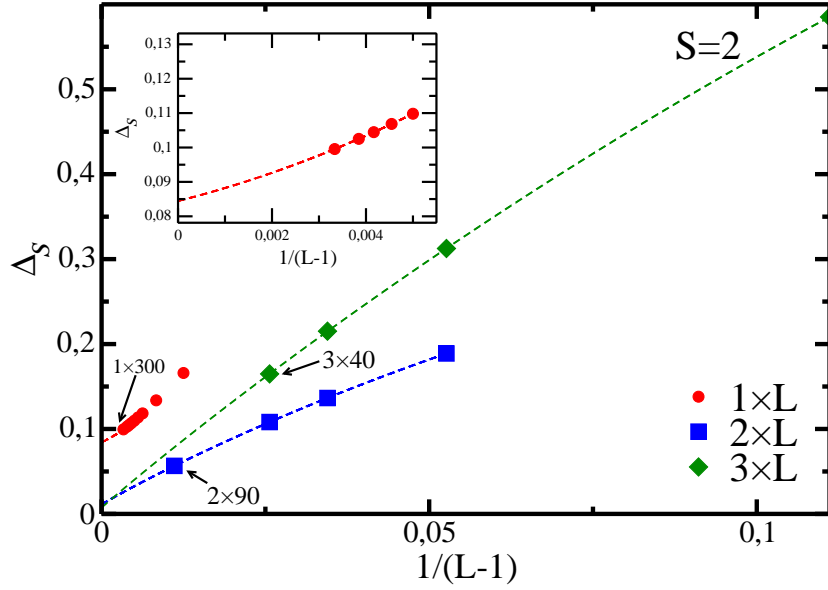


Figura 4.9: Δ_S vs. $\frac{1}{L-1}$ para as escadas de Heisenberg de spin-2. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas pontilhadas são os ajuste dos nossos dados com a equação (4.2). O gráfico inserido no gráfico principal é uma ampliação dos últimos pontos encontrados para a escada de Heisenberg de uma perna ($1 \times L$).

Tabela 4.8: Estimativas do gap de spin $\Delta_S^\infty(N)$ das escadas de Heisenberg de spin-2 com até três pernas.

N	Δ_S^∞
1	0,086
2	0,017
3	0,007

4.5 Spin- $\frac{5}{2}$

Nesta seção, mostraremos a energia do estado fundamental por sítio, assim como o gap de spin das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{5}{2}$. Apresentamos também uma estimativa do valor de e_∞ do modelo de Heisenberg bidimensional.

Energia do estado fundamental por sítio: e_∞

Na tabela 4.10, mostramos nossas estimativas de e_∞ das escadas de Heisenberg com até cinco pernas. Vale mencionar que não há na literatura, até onde sabemos, estimativas de e_∞ e Δ_S das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{5}{2}$. Na figura 4.10, reportamos e_∞ em função de $\frac{1}{N}$. A fim de estimar o valor de e_∞ do modelo de Heisenberg 2D, ajustamos nossos dados com a

Tabela 4.9: Estimativas do gap de spin que são encontrados na literatura da cadeia de Heisenberg de spin-2.

Referência	$\Delta_{S=2}^{\infty}$
[54]	0,08
[55]	0,02
[49]	0,055(15)
[56]	0,05
[57]	0,055(15)
[58]	0,049
[59, 60]	0,085(2)
[61]	0,074(16)
[48]	0,082(3)
[62]	0,085(1)
[64]	0,09(1)
[63]	0,0907(2)
[66]	$0,0876 \pm 0,0013$

equação (4.1). O valor encontrado foi $e_{\infty}^{2D} = -13,26$.

Tabela 4.10: Energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{5}{2}$ com até seis pernas e do modelo do Heisenberg 2D.

N	e_{∞}
1	-7,19228
2	-10,2851
3	-11,274
4	-11,76
5	-12,08
6	-12
∞	-13,26

Gap de spin: Δ_s

Na figura 4.11, apresentamos o gap de spin das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{5}{2}$ com até três pernas. Ajustando nossos dados com a equação (4.2), encontramos os valores de Δ_s^{∞} , os quais estão mostrados na tabela 4.11. Podemos observar que o gap de spin tende a zero para escadas com um número de ímpar de pernas, e para um valor finito e diferente de zero para a escada de duas pernas, como esperado pela conjectura Haldane-Sierra [1–3].

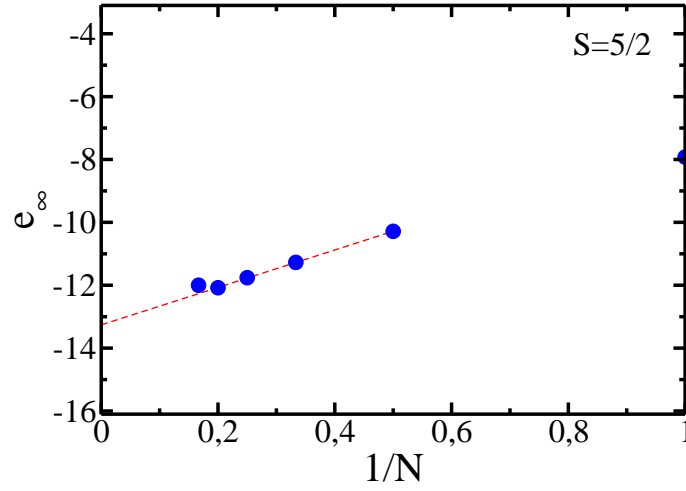


Figura 4.10: e_∞ vs. $\frac{1}{N}$. Os símbolos são os dados numéricos reportados na tabela 4.10. A linha pontilhada é um ajuste destes dados com a equação (4.1). Os pontos que não estão conectados pela linha pontilhada não foram considerados no ajuste.

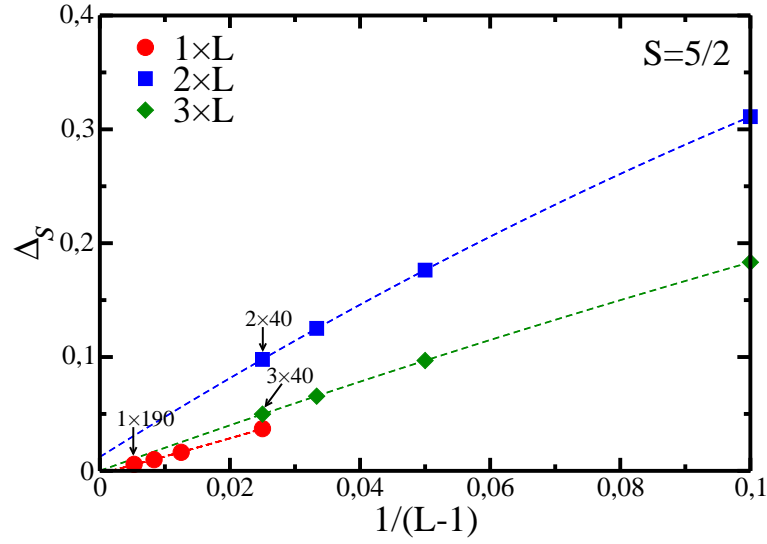


Figura 4.11: Δ_S vs. $\frac{1}{L-1}$ para as escadas de Heisenberg de spin- $\frac{5}{2}$ com até três pernas. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas pontilhadas são os ajustes dos nossos dados com a equação (4.2).

Tabela 4.11: Estimativas do gap de spin $\Delta_S^\infty(N)$ das escadas de Heisenberg de spin- $\frac{5}{2}$ com até três pernas.

N	Δ_S^∞
1	$8,95 \times 10^{-4}$
2	0,014
3	$6,96 \times 10^{-5}$

Conclusão

Neste trabalho, investigamos as escadas de Heisenberg de N pernas com spin- S . Como a grande maioria das cadeias quânticas, as escadas de Heisenberg não são passíveis de solução exata. Desse modo, a abordagem numérica é a forma mais eficaz e precisa de estudar estes sistemas. Talvez umas das técnicas numéricas mais poderosas no estudo de sistemas quase-unidimensionais é o grupo de renormalização da matriz de densidade (DMRG). Não obstante, a implementação da mesma é não trivial, e muito provavelmente por este fato poucos pesquisadores no Brasil não a implementaram. Vale mencionar que grande parte do nosso esforço, neste trabalho, foi dedicado à implementação do algoritmo do DMRG para as escadas de Heisenberg de N pernas com spin- S .

A física de baixas energias das escadas de Heisenberg é intrigante. A mais peculiar delas se refere ao gap de spin Δ_S . Tal gap pode ser nulo ou não, dependendo do número de pernas e do valor do spin. Em um trabalho seminal, Haldane [1, 2] considerou a cadeia de Heisenberg de spin- S e através de um mapeamento desta cadeia no modelo sigma não linear, ele [1, 2] conjecturou que o gap de spin é nulo para spin semi-inteiro e finito para spin inteiro. Uma generalização desta conjectura foi feita para as escadas de N pernas por Sierra [3]. Sierra encontrou que o gap de spin das escadas não depende somente do valor do spin, mas também do número de pernas. Escadas de spin semi-inteiro com um número ímpar (par) de pernas exibem um gap de spin nulo (finito), enquanto que escadas de spin inteiro exibem um gap de spin finito. Enquanto a conjectura Haldane foi amplamente testada [46–64, 66, 73, 74], a conjectura de Sierra para as escadas de N pernas e spin- S foi pouco verificada, sendo este o principal motivo deste trabalho. A fim de verificar a conjectura de Haldane-Sierra, investigamos detalhadamente as escadas de Heisenberg com até seis pernas e vários valores de spin.

Usando o DMRG, estimamos a energia do estado fundamental por sítio (e_∞) e o gap de spin (Δ_S) das escadas de Heisenberg com spin $S \leq \frac{5}{2}$ e até seis pernas. Nossos resultados estão em pleno acordo com a conjectura de Haldane-Sierra (veja capítulo 4). Em particular, nossas estimativas de e_∞ e Δ_S , para o caso de spin- $\frac{1}{2}$, estão em acordo com os resultados encontrados na literatura. No caso de spin maior que $\frac{1}{2}$ são conhecidos somente os valores de

e_∞ e Δ_S para a cadeia de Heisenberg (escada de uma perna) com $S \leq 2$. Até onde sabemos, os resultados obtidos por nós para os casos de $N > 1$ e $S > 1/2$ são originais. Pretendemos em breve redigir um artigo com estes resultados. Vale ainda salientar que através de um estudo de tamanho finito das escadas de Heisenberg somos capazes de estimar com uma precisão relativamente boa a energia por sítio do modelo de Heisenberg bidimensional.

Apêndice A

Produto tensorial

Seja $A \in R^{m \times n}$ e $B \in R^{p \times q}$. o tensorial (produto de Kronecker) de A e B é definido como a matriz abaixo:

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{1,1}B & \cdots & a_{1,n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}B & \cdots & a_{m,n}B \end{bmatrix} \in R^{mp \times nq}. \quad (\text{A.1})$$

Propriedades do Produto de Tensorial

i) Seja $A \in R^{m \times n}$ e as matrizes B e $C \in R^{p \times q}$, então: $A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C$.

Prova: Pela definição de produto tensorial, temos:

$$A \otimes (B + C) = \begin{bmatrix} a_{1,1}(B + C) & \cdots & a_{1,n}(B + C) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}(B + C) & \cdots & a_{m,n}(B + C) \end{bmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Utilizando o fato de que as matrizes possuem a propriedade distributiva, podemos notar que:

$$A \otimes (B + C) = \begin{bmatrix} a_{1,1}B + a_{1,1}C & \cdots & a_{1,n}B + a_{1,n}C \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}B + a_{m,1}C & \cdots & a_{m,n}B + a_{m,n}C \end{bmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

Logo,

$$A \otimes (B + C) = \begin{bmatrix} a_{1,1}B & \cdots & a_{1,n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}B & \cdots & a_{m,n}B \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_{1,1}C & \cdots & a_{1,n}C \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}C & \cdots & a_{m,n}C \end{bmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Assim,

$$A \otimes (B + C) = A \otimes B + A \otimes C. \quad (\text{A.5})$$

ii) Para toda $A \in R^{m \times n}$ e $B \in R^{p \times q}$, $(A \otimes B)^T = A^T \otimes B^T$.

Prova: Pela definição de produto tensorial, temos:

$$(A \otimes B)^T = \begin{bmatrix} a_{1,1}B & \cdots & a_{1,n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}B & \cdots & a_{m,n}B \end{bmatrix}^T. \quad (\text{A.6})$$

Portanto,

$$(A \otimes B)^T = \begin{bmatrix} a_{1,1} \begin{bmatrix} b_{1,1} & \cdots & b_{1,q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{p,1} & \cdots & b_{p,q} \end{bmatrix} & \cdots & a_{1,n} \begin{bmatrix} b_{1,1} & \cdots & b_{1,q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{p,1} & \cdots & b_{p,q} \end{bmatrix} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} \begin{bmatrix} b_{1,1} & \cdots & b_{1,q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{p,1} & \cdots & b_{p,q} \end{bmatrix} & \cdots & a_{m,n} \begin{bmatrix} b_{1,1} & \cdots & b_{1,q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{p,1} & \cdots & b_{p,q} \end{bmatrix} \end{bmatrix}^T. \quad (\text{A.7})$$

Utilizando a definição de matriz transposta, é fácil ver que:

$$(A \otimes B)^T = \begin{bmatrix} a_{1,1}B^T & \cdots & a_{m,1}B^T \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1,n}B^T & \cdots & a_{m,n}B^T \end{bmatrix} = A^T \otimes B^T. \quad (\text{A.8})$$

iii) Seja $A \in R^{m \times n}$, $B \in R^{r \times s}$, $C \in R^{n \times p}$ e $D \in R^{s \times t}$. Então,

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD \quad (\in R^{mr \times pt}). \quad (\text{A.9})$$

Prova: Utilizando a definição de produto tensorial, temos:

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = \begin{bmatrix} a_{1,1}B & \cdots & a_{1,n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1}B & \cdots & a_{m,n}B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{1,1}D & \cdots & c_{1,n}D \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m,1}D & \cdots & c_{m,n}D \end{bmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

Logo, podemos ver que:

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^n a_{1,k}c_{k,1}BD & \cdots & \sum_{k=1}^n a_{1,k}c_{k,p}BD \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=1}^n a_{m,k}c_{k,1}BD & \cdots & \sum_{k=1}^n a_{m,k}c_{k,p}BD \end{bmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

Portanto,

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD. \quad (\text{A.12})$$

iv) Sendo A e B matrizes inversíveis, então podemos mostrar que:

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}. \quad (\text{A.13})$$

Prova: Multiplicando por $(A \otimes B)$ de ambos os lados da equação acima, temos:

$$(A \otimes B)(A \otimes B)^{-1} = (A \otimes B)(A^{-1} \otimes B^{-1}). \quad (\text{A.14})$$

Utilizando a propriedade (iii), e o fato de que o produto de uma matriz por sua inversa é a matriz identidade, temos que:

$$I = AA^{-1} \otimes BB^{-1} = I. \quad (\text{A.15})$$

Assim, $(A \otimes B)$ é inversível e sua inversa é $A^{-1} \otimes B^{-1}$.

v) Seja $A \in R^{n \times n}$ e $B \in R^{m \times m}$. Então $\text{Tr}(A \otimes B) = (\text{Tr}A)(\text{Tr}B)$.

Prova: Utilizando a definição de produto tensorial, temos:

$$(A \otimes B) = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{1,1}b_{1,1} & \cdots & a_{1,1}b_{1,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1,1}b_{m,1} & \cdots & a_{1,1}b_{m,m} \end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix} a_{1,n}b_{1,1} & \cdots & a_{1,n}b_{1,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1,n}b_{m,1} & \cdots & a_{1,n}b_{m,m} \end{bmatrix} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \begin{bmatrix} a_{n,1}b_{1,1} & \cdots & a_{n,1}b_{1,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1}b_{m,1} & \cdots & a_{n,1}b_{m,m} \end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix} a_{n,n}b_{1,1} & \cdots & a_{n,n}b_{1,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,n}b_{m,1} & \cdots & a_{n,n}b_{m,m} \end{bmatrix} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.16})$$

Assim,

$$\text{Tr}(A \otimes B) = a_{1,1}(b_{1,1} + b_{2,2} + \cdots + b_{m,m}) + \cdots + a_{n,n}(b_{1,1} + b_{2,2} + \cdots + b_{m,m}). \quad (\text{A.17})$$

Logo,

$$\text{Tr}(A \otimes B) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_{i,i} b_{j,j}. \quad (\text{A.18})$$

Portanto,

$$\text{Tr}(A \otimes B) = \sum_{i=1}^n a_{i,i} \sum_{j=1}^m b_{j,j} = (\text{Tr} A)(\text{Tr} B). \quad (\text{A.19})$$

vi) Se $A \in R^{n \times n}$ e $B \in R^{m \times m}$ são matrizes simétricas, então $A \otimes B$ é simétrico.

Prova: Utilizando a propriedade (ii) e o fato de que $A^T = A$ e $B^T = B$, temos:

$$A \otimes B = A^T \otimes B^T = (A \otimes B)^T. \quad (\text{A.20})$$

vii) Se $A \in R^{n \times n}$ e $B \in R^{m \times m}$ são normais, então o produto tensorial de A e B é normal.

Prova: Utilizando a propriedade (ii), podemos ver que:

$$(A \otimes B)^T (A \otimes B) = (A^T \otimes B^T) (A \otimes B). \quad (\text{A.21})$$

Assim, pela propriedade (iii), temos:

$$(A \otimes B)^T (A \otimes B) = A^T A \otimes B^T B. \quad (\text{A.22})$$

Sendo A e B normais, então:

$$(A \otimes B)^T(A \otimes B) = AA^T \otimes BB^T. \quad (\text{A.23})$$

Portanto,

$$(A \otimes B)^T(A \otimes B) = (A \otimes B)(A \otimes B)^T. \quad (\text{A.24})$$

Apêndice B

Simetrias

Na construção da hamiltoniana de um sistema com spin- S em uma rede com L sítios temos que a dimensão da matriz (espaço de Hilbert) é $(2S+1)^L$. O fato do espaço de Hilbert crescer exponencialmente com L , se torna um grande problema do ponto de vista computacional, visto que a memória necessária para o estudo do sistema, em grandes redes, seria inviável. Uma forma de contornar tal problema é a implementação de simetrias para podermos diminuir as dimensões das matrizes a serem diagonalizadas.

É bem conhecido que quando dois operadores \hat{A} e \hat{B} comutam ($[\hat{A}, \hat{B}] = 0$) eles possuem uma base de autovetores em comum. Se a hamiltoniana é invariante a uma transformação O , então existe um operador \hat{O} tal que $[\hat{H}, \hat{O}] = 0$. Pode-se mostrar também que quando escrevemos a hamiltoniana na base em que \hat{O} é diagonal a matriz \hat{H} se torna bloco-diagonal, sendo estes blocos rotulados pelos autovalores de \hat{O} . Sabendo disto, é conveniente explorar as simetrias de \hat{H} para diagonalizar matrizes de dimensões menores. Abaixo apresentamos algumas simetrias, que exploramos no estudo do modelo de Heisenberg.

Simetria $U(1)$

A simetria $U(1)$ consiste na conservação da componente z do spin total $S_T^z = \sum_i S_i^z$. Os autovalores de S_T^z são:

$$\mathcal{S}_z = \sum_{i=1}^L m_i, \quad (\text{B.1})$$

sendo m_i [$m_i \in (-S, -S+1, \dots, S-1, S)$] a projeção do spin (em unidade de \hbar) do sítio i ao longo do eixo z (exemplo: o setor do estado $|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$ para $S = 1/2$ é $\mathcal{S}_z = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$).

Vale salientar que a implementação desta simetria no DMRG é extremamente fácil (uma

vez que basta somar as componentes do magnetização total de cada bloco). Contudo, uma implementação eficiente desta simetria não é trivial e só é possível utilizando vários truques. O estado da arte do DMRG reside nestes truques.

Simetria de translação

A nível de completeza também apresentamos a simetria de translação. Nós implementamos esta simetria na técnica de diagonalização exata. Os resultados fornecidos por diagonalização exata foram utilizados para verificar se os resultados do DMRG estavam corretos, no caso de condições periódicas de contorno (não apresentados neste trabalho).

A invariância translacional é somente permitida sob condições periódicas de contorno. Para o caso unidimensional,¹ o operador translação \hat{P} é definido como:

$$\hat{P}|n_1, n_2, \dots, n_{L-1}, n_L\rangle = |n_L, n_1, n_2, \dots, n_{L-1}\rangle. \quad (\text{B.2})$$

Da equação (B.2), podemos notar que:

$$\hat{P}^L|n_1, n_2, \dots, n_{L-1}, n_L\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_{L-1}, n_L\rangle \implies \hat{P}^L = \mathbf{1}. \quad (\text{B.3})$$

A partir da equação (B.3), podemos facilmente ver que os autovalores de \hat{P} são $\lambda_t = e^{\frac{2\pi i}{L}t}$ ($t = 0, 1, \dots, L-1$). Por outro lado, os autoestados de \hat{P} são dados por²:

$$|\Psi_t\rangle = c_t \sum_{i=0}^{L-1} \left(\lambda_t^{-1} \hat{P}\right)^i |\psi\rangle. \quad (\text{B.4})$$

Na equação (B.4) $|\psi\rangle$ é um estado arbitrário e c_t é uma constante de normalização. A constante de normalização pode ser determinada de forma analítica se conhecermos γ , tal que:

$$\hat{P}^\gamma |\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (\text{B.5})$$

Escrevendo o autoestado de \hat{P} em termos de γ ($\gamma \leq L$),³ temos que:

$$\begin{aligned} |\Psi_t\rangle = c_t & \left[\left(1 + \lambda_t^{-1} \hat{P} + \lambda_t^{-2} \hat{P}^2 + \dots + \lambda_t^{-(\gamma-1)} \hat{P}^{\gamma-1} \right) + \left(\lambda_t^{-\gamma} \hat{P}^\gamma + \lambda_t^{-(\gamma+1)} \hat{P}^{\gamma+1} + \dots + \lambda_t^{-(2\gamma-1)} \hat{P}^{2\gamma-1} \right. \right. \\ & \left. \left. + \dots + \lambda_t^{-(2\gamma-1)} \hat{P}^{2\gamma-1} \right) + \dots + \left\{ \lambda_t^{-(n-1)\gamma} \hat{P}^{(n-1)\gamma} + \lambda_t^{-[(n-1)\gamma+1]} \hat{P}^{[(n-1)\gamma+1]} \dots + \lambda_t^{-(n\gamma-1)} \hat{P}^{n\gamma-1} \right\} \right] |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

¹No caso bidimensional (ou das escadas de N pernas) é possível também definir o operador translação de forma similar a equação (B.2).

²É fácil verificar que $|\psi_t\rangle$ são autovetores de \hat{P} .

³Por exemplo, para o estado $|\psi\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ o valor de γ é 4.

Sendo $n = \frac{L}{\gamma}$. Utilizando a equação (B.5), podemos escrever:

$$|\Psi_t\rangle = c_t \left[\left(1 + \lambda_t^{-\gamma} + \lambda_t^{-2\gamma} \dots \lambda_t^{-(n-1)\gamma} \right) |\psi\rangle + \left(\lambda_t^{-1} + \lambda_t^{-(\gamma+1)} + \lambda_t^{-(2\gamma+1)} + \dots + \right. \right. \\ \left. \left. + \lambda_t^{-[(n-1)\gamma+1]} \right) \hat{P}|\psi\rangle + \dots + \left(\lambda_t^{-(\gamma-1)} + \lambda_t^{-(2\gamma-1)} \dots + \lambda_t^{-(n\gamma-1)} \right) \hat{P}^{\gamma-1}|\psi\rangle \right]. \quad (\text{B.7})$$

Logo,

$$|\Psi_t\rangle = c_t \left[\left(1 + \lambda_t^{-\gamma} + \lambda_t^{-2\gamma} \dots \lambda_t^{-(n-1)\gamma} \right) \left(|\psi\rangle + \lambda_t^{-1} \hat{P}|\psi\rangle + \dots + \lambda_t^{-(\gamma-1)} \hat{P}^{\gamma-1}|\psi\rangle \right) \right]. \quad (\text{B.8})$$

Usando, o fato de que os autoestados de \hat{P} são ortonormalizados, temos:

$$\langle \Psi_t | \Psi_t \rangle = 1, \quad (\text{B.9})$$

$$|c_t|^2 \left| \left(1 + \lambda_t^{-\gamma} + \lambda_t^{-2\gamma} \dots \lambda_t^{-(n-1)\gamma} \right) \right|^2 \left(|\psi\rangle + \lambda_t^{-1} \hat{P}|\psi\rangle + \dots + \right. \\ \left. + \lambda_t^{-(\gamma-1)} \hat{P}^{\gamma-1}|\psi\rangle \right)^\dagger \left(|\psi\rangle + \lambda_t^{-1} \hat{P}|\psi\rangle + \dots + \lambda_t^{-(\gamma-1)} \hat{P}^{\gamma-1}|\psi\rangle \right) = 1, \quad (\text{B.10})$$

e portanto,

$$|c_t|^2 \left| \left(1 + \lambda_t^{-\gamma} + \lambda_t^{-2\gamma} \dots \lambda_t^{-(n-1)\gamma} \right) \right|^2 \underbrace{(1 + 1 + \dots + 1)}_{=\gamma} = 1. \quad (\text{B.11})$$

De modo que podemos escrever a normalização, em termos de $\{\lambda_t\}$ e γ , da seguinte forma:

$$c_t = \frac{1}{\sqrt{\gamma \left| \left(1 + \lambda_t^{-\gamma} + \lambda_t^{-2\gamma} \dots \lambda_t^{-(n-1)\gamma} \right) \right|^2}}. \quad (\text{B.12})$$

Vale ressaltar que não é possível aplicar a simetria de translação no DMRG devido ao fato da estrutura da cadeia ser dividida em duas partes (sistema e reservatório).

Apêndice C

Matriz de Densidade

É comum, ao investigarmos um sistema, que chamaremos de universo, estarmos interessados em explorar apenas uma parte dele. Por esta razão, consideraremos o universo dividido em duas partes - sistema e o resto do universo.

Denotamos $\{|i\rangle_A\}$ $\{|j_B\rangle\}$ os estados que descrevem o sistema [resto do universo]. Dessa forma, um estado do universo pode ser escrito da forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_A j_B} C_{i_A j_B} |i_A\rangle |j_B\rangle. \quad (\text{C.1})$$

Seja A um operador que atua somente no sistema, isto é, A não age sobre $\{|j_B\rangle\}$. Assim, o valor médio de A , é escrito como:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{i_A j_B i'_A j'_B} C_{i_A j_B}^* C_{i'_A j'_B} \langle j_B | \langle i_A | A | i'_A \rangle | j'_B \rangle \quad (\text{C.2})$$

$$= \sum_{i_A j_B i'_A j'_B} C_{i_A j_B}^* C_{i'_A j'_B} \langle i_A | A | i'_A \rangle \underbrace{\langle j_B | j'_B \rangle}_{\delta_{j_B, j'_B}} \quad (\text{C.3})$$

$$= \sum_{i_A j_B i'_A} C_{i_A j_B}^* C_{i'_A j_B} \langle i_A | A | i'_A \rangle. \quad (\text{C.4})$$

A matriz de densidade é definida como:

$$\rho_{i'_A, i_A} = \sum_{j_B} C_{i_A j_B}^* C_{i'_A j_B}. \quad (\text{C.5})$$

De modo que

$$\langle A \rangle = \sum_{i_A i'_A} \langle i_A | A | i'_A \rangle \rho_{i'_A, i_A}. \quad (\text{C.6})$$

É fácil ver, a partir da equação (C.5), que a matriz de densidade é hermitiana.

C.1 Propriedades da Matriz de Densidade

Valor Médio de um Operador A

Nós podemos escrever o operador ρ na base do sistema tal que $\rho_{i'_A i_A} = \langle i'_A | \rho | i_A \rangle$. Logo, o valor médio de A pode ser escrito como:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{i_A i'_A} \langle i_A | A | i'_A \rangle \rho_{i'_A i_A} \quad (\text{C.7})$$

$$= \sum_{i_A i'_A} \langle i_A | A | i'_A \rangle \langle i'_A | \rho | i_A \rangle \quad (\text{C.8})$$

$$= \sum_{i_A} \langle i_A | A \sum_{i'_A} | i'_A \rangle \langle i'_A | \rho | i_A \rangle. \quad (\text{C.9})$$

Sabendo que $\{|i_A\rangle\}$ forma um conjunto completo, isto é, $\sum_{i'_A} |i'_A\rangle \langle i'_A| = 1$, temos que:

$$\langle A \rangle = \sum_{i_A} \langle i_A | A \rho | i_A \rangle = \text{tr}(A\rho). \quad (\text{C.10})$$

Autovalores de ρ

Seja $\{w_i\}$ e $\{|i\rangle\}$ o conjunto de autovalores e autovetores da matriz de densidade, respectivamente. Como os autoestados de uma matriz hermitiana formam um conjunto completo ortonormal, podemos escrever:

$$\rho = \sum_i w_i |i\rangle \langle i|. \quad (\text{C.11})$$

Fazendo $A = 1$ na equação (B.12), temos ¹:

$$\langle A \rangle = \text{tr}(\rho A) = \text{tr}(\rho) = \sum_i \langle i | \rho | i \rangle = 1. \quad (\text{C.12})$$

Logo,

$$\sum_i w_i = 1.$$

¹Note que o traço independe da base escolhida.

Já se escolhermos $A = |i'\rangle\langle i'|$, vemos que:

$$\langle A \rangle = \text{tr}(\rho A) = \sum_i \langle i | \rho A | i \rangle = \sum_i \langle i | \rho | i' \rangle \langle i' | i \rangle = \sum_i w_i \underbrace{\langle i | i' \rangle}_{\delta_{i,i'}} \underbrace{\langle i' | i \rangle}_{\delta_{i',i}} = w_{i'}. \quad (\text{C.13})$$

Por outro lado,

$$w_{i'} = \langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (\text{C.14})$$

$$= \langle \psi | i' \rangle \langle i' | \psi \rangle \quad (\text{C.15})$$

$$= \langle \psi | i' \rangle \underbrace{\sum_{j_B} |j_B\rangle \langle j_B|}_{=1} |i'\rangle | \psi \rangle \quad (\text{C.16})$$

$$= \sum_{j_B} (\langle \psi | i' \rangle |j_B\rangle) (\langle j_B | i' \rangle | \psi \rangle) \quad (\text{C.17})$$

$$= \sum_{j_B} |(\langle j_B | i' \rangle | \psi \rangle)|^2 \geq 0. \quad (\text{C.18})$$

Portanto, da equação (C.18), podemos ver que os autovalores de ρ são sempre positivos. Note também que podemos expressar $\langle A \rangle$ da seguinte forma,

$$\langle A \rangle = \text{tr}(\rho A) = \sum_{i'} \langle i' | \rho A | i' \rangle \quad (\text{C.19})$$

$$= \sum_{i'} \langle i' | \rho \underbrace{\sum_i |i\rangle \langle i|}_{=1} A | i' \rangle \quad (\text{C.20})$$

$$= \sum_{ii'} \langle i' | \rho | i \rangle \langle i | A | i' \rangle \quad (\text{C.21})$$

$$= \sum_{ii'} w_i \underbrace{\langle i' | i \rangle}_{\delta_{i,i'}} \langle i | A | i' \rangle \quad (\text{C.22})$$

$$= \sum_i w_i \langle i | A | i \rangle. \quad (\text{C.23})$$

Como $\langle i | A | i \rangle$ é o valor esperado de A quando o sistema está no estado $|i\rangle$, nós podemos interpretar w_i como a probabilidade do sistema estar no estado $|i\rangle$. Caso apenas um autovalor da matriz de densidade seja diferente de zero dizemos que o sistema está em um estado puro, caso contrário dizemos que o sistema está em um estado misto. Note que se o sistema está em um estado puro $|i_p\rangle$, então $\rho = |i_p\rangle\langle i_p|$. Logo,

$$\rho^2 = |i_p\rangle \underbrace{\langle i_p|i_p\rangle}_{=1} \langle i_p| = |i_p\rangle \langle i_p| = \rho. \quad (\text{C.24})$$

Para maiores detalhes sobre matriz de densidade recomendamos o livro *Statistical Mechanics - A Set of Lectures* de R. P. Feymann [101].

Apêndice D

Decomposição do Valor Singular

A decomposição do valor singular garante que para uma matriz arbitrária (real ou complexa) M , de dimensão $N_A \times N_B$, sempre existe uma decomposição da forma [102]:

$$M = USV^\dagger, \quad (\text{D.1})$$

onde U e V^\dagger são matrizes de dimensões $N_A \times \min(N_A, N_B)$ e $\min(N_A, N_B) \times N_B$, respectivamente. A matriz U (V^\dagger) tem colunas (linhas) ortonormais, isto é, $UU^\dagger = 1$ ($VV^\dagger = 1$). A matriz S é uma matriz diagonal, de dimensão $\min(N_A, N_B) \times \min(N_A, N_B)$, e suas entradas $S_{ka} = s_a \delta_{k,a}$ são não negativas, também chamadas de valores singulares.

Sabemos que qualquer estado quântico de um sistema bipartido A e B , pode ser escrito como:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_A j_B} \Psi_{i_A j_B} |i_A\rangle |j_B\rangle, \quad (\text{D.2})$$

sendo $\{|i_B\rangle\}$ e $\{|j_B\rangle\}$ uma base ortonormal de A e B , respectivamente. Usando a decomposição do valor singular para a matriz Ψ , formada pelos coeficientes $\Psi_{i_A j_B}$, temos,

$$\Psi = USV^\dagger \quad \rightarrow \quad \Psi_{i_A j_B} = (USV^\dagger)_{i_A j_B}. \quad (\text{D.3})$$

Assim, o elemento $\Psi_{i_A j_B}$ é dado por:

$$\Psi_{i_A j_B} = \sum_{k,a} U_{i_A k} S_{ka} V_{j_B a}^*. \quad (\text{D.4})$$

Uma vez que S uma matriz diagonal, podemos ver que,

$$\Psi_{i_A j_B} = \sum_a U_{i_A a} S_{aa} V_{j_B a}^* = \sum_a U_{i_A a} s_a V_{j_B a}^*. \quad (\text{D.5})$$

Logo, o estado $|\psi\rangle$ pode ser escrito como:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_A j_B} \sum_a U_{i_A a} s_a V_{j_B a}^* |i_A\rangle |j_B\rangle = \sum_a s_a \sum_{i_A} U_{i_A a} |i_A\rangle \sum_{j_B} V_{j_B a}^* |j_B\rangle. \quad (\text{D.6})$$

Definindo $|a_A\rangle = \sum_{i_A} U_{i_A a} |i_A\rangle$ e $|a_B\rangle = \sum_{j_B} V_{j_B a}^* |j_B\rangle$, temos,

$$|\psi\rangle = \sum_a s_a |a_A\rangle |a_B\rangle. \quad (\text{D.7})$$

Se restringirmos a soma somente sobre os r valores singulares (s_a) diferentes de zero, nós obtemos a decomposição de Schmidt:

$$|\psi\rangle = \sum_{a=1}^r s_a |a_A\rangle |a_B\rangle. \quad (\text{D.8})$$

Note que se $r = 1$, $|\psi\rangle$ é um estado não emaranhado (puro). Por outro lado se $r > 1$, $|\psi\rangle$ é um estado emaranhado (misto).

Vamos agora relacionar os valores singulares s_a com os autovalores da matriz de densidade reduzida. Seja a matriz de densidade dada por:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (\text{D.9})$$

Logo, podemos escrever,

$$\rho = \sum_{aa'} s_a |a_A\rangle |a_B\rangle s_{a'}^* \langle a'_A| \langle a'_B| = \sum_{aa'} s_a s_{a'}^* (|a_A\rangle \otimes |a_B\rangle) (\langle a'_A| \otimes \langle a'_B|). \quad (\text{D.10})$$

Sabendo que, $(C \otimes D)(E \otimes F) = (CE \otimes DF)$, temos,

$$\rho = \sum_{aa'} s_a s_{a'}^* (|a_A\rangle \langle a'_A| \otimes |a_B\rangle \langle a'_B|). \quad (\text{D.11})$$

É útil definirmos a matriz de densidade reduzida do sistema A como:

$$\rho_A = \text{tr}_B(\rho). \quad (\text{D.12})$$

Assim,

$$\rho_A = \text{tr}_B \sum_{aa'} s_a s_{a'}^* (|a_A\rangle \langle a'_A| \otimes |a_B\rangle \langle a'_B|) = \sum_{aa'} s_a s_{a'}^* |a_A\rangle \langle a'_A| \text{tr}_B (|a_B\rangle \langle a'_B|). \quad (\text{D.13})$$

Mas,

$$\text{tr}_B(|a_B\rangle\langle a'_B|) = \sum_{a''} \langle a''_B|a_B\rangle\langle a'_B|a''_B\rangle = \sum_{a''} \delta_{a'',a} \delta_{a',a''} = \delta_{a,a'}. \quad (\text{D.14})$$

Logo, podemos escrever a equação (D.13) da seguinte forma:

$$\rho_A = \sum_{aa'} s_a s_{a'}^* |a_A\rangle\langle a'_A| \delta_{a,a'} = \sum_a s_a s_a^* |a_A\rangle\langle a_A| = \sum_a |s_a|^2 |a_A\rangle\langle a_A|. \quad (\text{D.15})$$

Note que, $\{|a\rangle_A\}$ são autovetores de ρ_A e $\{|s_a|^2\}$ são seus respectivos autovalores. Desse modo, podemos ver, a partir da equação (D.7), que os autoestados que “mais” contribuem para o estado $|\psi\rangle$ são os autoestados que possuem os maiores autovalores da matriz de densidade reduzida. Observando a equação (C.11) podemos notar que os valores singulares são $s_a = \sqrt{w_a}$.

Apêndice E

Método de Lanczos

A técnica numérica de Lanczos [103] é muito usada quando o interesse é determinar apenas os autoestados associados com as energias mais baixas. A idéia principal da técnica resume-se em expressar o estado fundamental, e alguns estados excitados, em termos de um pequeno conjunto de funções de onda ortonormais entre si, construídas iterativamente. Esta técnica é extremamente útil quando as dimensões das matrizes a serem diagonalizadas forem da ordem de dezenas de milhões.

Este método consiste essencialmente em escrever uma matriz em relação a uma base de um espaço vetorial que a transforme em uma matriz tridiagonal, ou seja, somente a diagonal principal e suas adjacentes possuem elementos não nulos.

Desejamos escrever um operador hermitiano \hat{H} na forma tridiagonal:

$$\hat{H}_{trid} = \begin{bmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ c_1 & a_1 & b_2 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & a_2 & b_3 & 0 \\ 0 & 0 & c_3 & a_3 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{bmatrix}. \quad (\text{E.1})$$

Definimos os estados da base de Lanczos por $|i\rangle$, $i = 0, 1, 2, \dots, d$, sendo d a dimensão¹ de \hat{H} . Escolhe-se, inicialmente, um estado arbitrário normalizado $|0\rangle$,² isto é, $\langle 0|0\rangle = 1$. Assim, a primeira linha da matriz tridiagonal definida na equação (E.1) deve ser da forma:

$$\hat{H}|0\rangle = a_0|0\rangle + b_1|1\rangle. \quad (\text{E.2})$$

¹A dimensão é tipicamente da ordem de alguns milhões.

²Se o estado arbitrário for “muito próximo” ao estado fundamental, é necessário poucas iterações para obter a energia do estado fundamental [equações (E.13) - (E.15)]. É possível usar este fato no DMRG para ter um grande ganho computacional (veja a referência [94]).

Como veremos, por construção, a matriz será hermitiana e os estados serão ortonormais. Então aplicando $\langle 0|$ na equação (E.2), temos que:

$$a_0 = \langle 0|\hat{H}|0\rangle. \quad (\text{E.3})$$

Temos também da equação (E.2) que,

$$|1\rangle = \frac{\hat{H}|0\rangle - a_0|0\rangle}{b_1}. \quad (\text{E.4})$$

Calculando $\langle 1|1\rangle$, podemos ver que:

$$\langle 1|1\rangle = \frac{\left(\langle 0|\hat{H} - \langle 0|a_0\right) \left(\hat{H}|0\rangle - a_0|0\rangle\right)}{b_1^2}, \quad (\text{E.5})$$

e como $\langle 1|1\rangle = 1$, temos:

$$b_1^2 = \left(\langle 0|\hat{H} - \langle 0|a_0\right) \left(\hat{H}|0\rangle - a_0|0\rangle\right), \quad (\text{E.6})$$

logo,

$$b_1 = \sqrt{\left(\langle 0|\hat{H} - \langle 0|a_0\right) \left(\hat{H}|0\rangle - a_0|0\rangle\right)}. \quad (\text{E.7})$$

Olhando agora para a segunda linha da matriz tridiagonal, temos:

$$\hat{H}|1\rangle = c_1|0\rangle + a_1|1\rangle + b_2|2\rangle. \quad (\text{E.8})$$

Atuando $\langle 0|$ à esquerda da equação (E.8), notamos que:

$$\langle 0|\hat{H}|1\rangle = c_1 = b_1^*. \quad (\text{E.9})$$

Aplicando agora $\langle 1|$ na equação (E.8), podemos escrever que:

$$a_1 = \langle 1|\hat{H}|1\rangle. \quad (\text{E.10})$$

Ainda da equação (E.8), temos:

$$|2\rangle = \frac{\hat{H}|1\rangle - a_1|1\rangle - c_1|0\rangle}{b_2}. \quad (\text{E.11})$$

Logo,

$$b_2 = \sqrt{(\langle 1|\hat{H} - \langle 1|a_1 - \langle 0|c_1)(\hat{H}|1\rangle - a_1|1\rangle - c_1|0\rangle)}. \quad (\text{E.12})$$

Generalizando:

$$a_i = \langle i | \hat{H} | i \rangle, \quad (\text{E.13})$$

$$b_i = \sqrt{\left(\langle i-1 | \hat{H}^2 | i-1 \rangle - 2c_{i-1} \langle i-1 | \hat{H} | i-2 \rangle - a_{i-1}^2 + c_{i-1}^2 \right)}, \quad (\text{E.14})$$

$$c_i = b_i^*. \quad (\text{E.15})$$

Até aqui, nós mostramos apenas como é feita a mudança de base da hamiltoniana. Desse modo, se quisermos encontrar as energias desta hamiltoniana, devemos diagonalizar a mesma. Em geral, estamos interessados apenas nas mais baixas energias. Uma vez que o método de Lanczos é um método variacional [104], para determinar as mais baixas energias, não é necessário diagonalizar a matriz original (com a dimensão do espaço de Hilbert). Podemos diagonalizar a hamiltoniana iterativamente, até que as energias de interesse sejam convergidas. Em geral, é necessário somente algumas iterações (~ 200) para determinarmos as mais baixas energias com uma grande precisão. Ou seja, ao invés de diagonalizar a matriz original, de dimensão $d \sim 10^6$, para determinarmos a energia do estado fundamental, diagonalizamos uma matriz tridiagonal da ordem de 200.

Referências Bibliográficas

- [1] F. D. M. Haldane, *Phys. Lett.* **93A**, 464 (1983).
- [2] F. D. M. Haldane, *Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State*, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
- [3] G. Sierra, *The nonlinear sigma model and spin ladders*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 3299 (1996).
- [4] F. N. Mott, R. Peierls, *Discussion of the paper by de Boer and Verwey*, *Proceedings of the Physical Society of London* **49**, 72 (1937).
- [5] F. N. Mott, *The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals*, *Proceedings of the Physical Society of London Series A* **62**, 416 (1949).
- [6] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Graduate Texts in Contemporary Physics, Springer-Verlag, Berlin (1994).
- [7] E. Dagotto, T. M. Rice, *Surprises on the way from one- to two- dimensional quantum magnets: The ladders materials*, *Science* **271**, 618 (1996).
- [8] H. Bethe, *On the theory of metals, I. eigenvalues and eigenfunctions of a linear chain of atoms*, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [9] P. Jordan, E. Wigner, *Über das Paulische Äquivalenzverbot*, *Z. Phys.* **47**, 631 (1928).
- [10] J. M. Luttinger, *An exactly soluble model of a many-fermion system*, *J. Math. Phys.* **4**, 1154 (1963).
- [11] D. C. Mattis, E. H. Lieb, *Exact solution of a many-fermion system and its associated boson field*, *J. Math. Phys.* **6**, 304 (1965).
- [12] A. Luther, I. Peschel, *Single-particle states, Kohn anomaly, and pairing fluctuations in 1 dimension*, *Phys. Rev. B* **9**, 7, 2911 (1974).

- [13] A. Luther, I. Peschel, *Calculation of critical exponents in 2 dimensions from quantum field-theory in one dimension*, *Phys. Rev. B* **12**, 9, 3908 (1975).
- [14] D. C. Mattis, *New wave-operator identity applied to the study of a persistent currents in 1D*, *J. Math. Phys.* **15**, 609 (1974).
- [15] R. Heidenreich, R. Seiler, A. Uhlenbrock, *The Luttinger model*, *J. Stat. Phys.* **22**, 27 (1980).
- [16] F. D. M. Haldane, *'Luttinger liquid theory' of one-dimensional quantum fluids. I. Properties of the Luttinger model and their extension to the general 1D interacting spinless Fermi gas*, *J. Phys. C* **14**, 2585 (1981).
- [17] F. D. M. Haldane, *General Relation of Correlation Exponents and Spectral Properties of One-Dimensional Fermi Systems: Application to the Anisotropic $S = \frac{1}{2}$ Heisenberg Chain*, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 16, 1358 (1980).
- [18] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press (1982).
- [19] E. Dagotto, *Correlated electrons in high-temperature superconductors*, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
- [20] S. R. White, *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [21] S. R. White, *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*, *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).
- [22] A. L. Malvezzi, *An Introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems*, *Brazilian Journal Physics* **33**, 55 (2003).
- [23] K. Hallberg, *New trends in Density Matrix Renormalization*, *Advances in Physics* **55**, 477 (2006).
- [24] R. R. Santos, *Introduction to Quantum Monte Carlo Simulations for fermionic systems*, *Brazilian Journal Physics* **33**, 36 (2003).
- [25] W. von der Linden, *A Quantum Monte Carlo approach to many-body physics*, *Phys. Rep.* **220**, 53 (1992).
- [26] E. Dagotto, J. Riera, D. Scalapino, *Superconductivity in ladders and coupled planes*, *Phys. Rev. B* **45**, 5744 (1992).

- [27] M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, Y. Kitaoka, *Observation of a spin Gap in $SrCu_2O_3$ comprising $spin-\frac{1}{2}$ quasi-1D two-Leg ladders*, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3463 (1994).
- [28] D. C. Johnston, J. W. Johnson, D. P. Goshom, A. P. Jacobson, *Magnetic susceptibility of $(VO)_2P_2O_7$: A one-dimensional $spin-\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnet with a ladder spin configuration and a singlet ground state*, *Phys. Rev. B* **35**, 219 (1987).
- [29] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley Publishing Company (1994).
- [30] M. Hase, I. Terasaki, K. Uchinokura, *Observation of the spin-Peierls transition in linear Cu^{2+} ($spin-\frac{1}{2}$) chains in an inorganic compound $CuGeO_3$* , *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3651 (1993).
- [31] T. Ami, M. K. Crawford, R. L. Harlow, Z. R. Wang, D. C. Johnston, Q. Huang, R. W. Erwin, *Magnetic susceptibility and low-temperature structure of the linear chain cuprate Sr_2CuO_3* , *Phys. Rev. B* **51**, 5994 (1995).
- [32] D. A. Tennant, R. A. Cowley, S. E. Nagler, A. M. Tsvelik, Stephen E. Nagler, Stephen E. Nagler, *Measurement of the spin-excitation continuum in one-dimensional $KCuF_3$ using neutron scattering*, *Phys. Rev. B* **52**, 13368 (1995).
- [33] N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, *Magnetic Susceptibility of Ideal $Spin-\frac{1}{2}$ Heisenberg Antiferromagnetic Chain Systems, Sr_2CuO_3 and $SrCuO_2$* , *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3212 (1996).
- [34] K. R. Thurber, A. W. Hunt, T. Imai, F. C. Chou, *^{17}O NMR study of $q = 0$ spin excitations in a nearly ideal $S = \frac{1}{2}$ 1D heisenberg antiferromagnet, Sr_2CuO_3 , up to 800K*, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 247202 (2001).
- [35] W. J. L. Buyers, R. M. Morra, R. L. Armstrong, M. J. Hogan, P. Gerlach, K. Hirakawa, *Experimental evidence for the Haldane gap in a spin-1 nearly isotropic, antiferromagnetic chain*, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 371 (1986).
- [36] J. P. Renard, M. Verdaguer, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, W. G. Stirling, *Presumption for a quantum energy gap in the quasi-one-dimensional $S = 1$ Heisenberg antiferromagnet $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$* , *Europhys. Lett.* **3**, 945 (1987).
- [37] H. Mutka, C. Payen, P. Molinié, J. L. Soubeyroux, P. Colombet, A. D. Taylor, *Dynamic structure factor $[S(Q, \omega)]$ of the $S = 1$ quasi-one-dimensional Heisenberg antiferromagnet: Neutron-scattering study on $AgVP_2S_6$* , *Phys. Rev. Lett.* **67**, 497 (1991).

- [38] C. P. Landee, K. A. Reza, M. R. Bond, R. D. Willet, *Low-temperature crystal structures of two Haldane-gap nickel chains, NENP and NENF*, *Phys. Rev. B* **56**, 147 (1997).
- [39] M. Niel, C. Cros, G. Le Flem, M. Pouchard, P. Hagenmuller, *Magnetic behaviour of vanadium +II in one- and two-dimensional systems*, *Physica B* **86-88**, 702 (1977).
- [40] H. Mutka, C. Payen, P. Molinié, *One-dimensional Heisenberg antiferromagnet with $S = \frac{3}{2}$. Experiments on AgCrP_2S_6* , *Europhys. Lett.* **21**, 623 (1993).
- [41] S. Itoh, K. Kakurai, Y. Endoh, H. Tanaka, *Inelastic pulsed-neutron scattering from CsVCl_3* , *Physica B* **213&214**, 161 (1995).
- [42] G. E. Granroth, M. W. Meisel, M. Chaparala, B. H. Ward, D. R. Talham, *Experimental evidence of a Haldane Gap in an $S = 2$ Quasi-Linear-Chain Antiferromagnet*, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1616 (1996).
- [43] E. Micotti, Y. Furukawa, K. Kugamai, S. Caretta, A. Lascialfari, F. Borsa, G. A. Timco, R. E. P. Winpenny, *Local spin moment distribution in antiferromagnetic molecular rings probed by NMR*, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 267204 (2006).
- [44] T. Guidi, J. R. D. Copley, Y. Qiu, S. Carretta, P. Santini, G. Amoretti, G. Timco, R. E. P. Winpenny, C. L. Dennis, R. Caciuffo, *Spin dynamics of Fe_7M ($M = \text{Zn}, \text{Mn}$) heterometallic rings probed by neutron spectroscopy*, *Phys. Rev. B* **75**, 014408 (2007).
- [45] L. Hulthén, *Arkiv Fysik* **26A**, 1 (1938).
- [46] S. Todo, K. Kato, *Cluster Algorithms for General-S Quantum Spin Systems*, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 047203 (2001).
- [47] T. Kennedy, *Exact diagonalisations of open spin-1 chains*, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 5737 (1990).
- [48] S. Qin, Y. Liu, L. Yu, *Finite-size scaling for low-energy excitations in integer Heisenberg spin chains*, *Phys. Rev. B* **55**, 2721 (1997).
- [49] S. Qin, T. Ng, Z. Su, *Edge states in open antiferromagnetic Heisenberg chains*, *Phys. Rev. B* **52**, 12844 (1995).
- [50] S. R. White, D. A. Huse, *Numerical renormalization-group study of low-lying eigenstates of the antiferromagnetic $S = 1$ Heisenberg chain*, *Phys. Rev. B* **48**, 3844 (1993).
- [51] O. Golinelli, Th. Jolicoeur, R. Lacaze, *Finite-lattice extrapolations for a Haldane-gap antiferromagnet*, *Phys. Rev. B* **50**, 3037 (1994).

- [52] K. Hallberg, X. Q. G. Wang, P. Horsch, A. Moreo, *Critical Behavior of the $S = \frac{3}{2}$ Antiferromagnetic Heisenberg Chain*, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4955 (1996).
- [53] G. Sun, F. Pu, *Monte Carlo calculations on the spin- $\frac{3}{2}$ Heisenberg antiferromagnetic chains*, *Physica B* **193**, 243 (1994).
- [54] J. Deisz, M. Jarrell, D. L. Cox, *Dynamical properties of one-dimensional antiferromagnets: A monte Carlo study*, *Phys. Rev. B* **48**, 10227 (1993).
- [55] N. Hatano, M. Suzuki, *Correlation length of the $S = 2$ antiferromagnetic Heisenberg chain*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **62**, 1346 (1993).
- [56] G. Sun, *Numerical solution of the spin-2 Heisenberg antiferromagnetic chains using a projector method*, *Phys. Rev. B* **51**, 8370 (1995).
- [57] N. Y. K. Totsuka, N. Hatano, M. Suzuki, *Real-space renormalization-group analysis of the $S = 2$ antiferromagnetic Heisenberg chain*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 414 (1995).
- [58] S. Yamamoto, *Quantum Monte Carlo approach to elementary excitations of antiferromagnetic Heisenberg chains*, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3348 (1995).
- [59] U. Schollwöck, T. Jolicoeur, *Haldane Gap and hidden order in the $S = 2$ antiferromagnetic Quantum Spin Chain*, *Europhys. Lett.* **30**, 493 (1995).
- [60] U. Schollwöck, O. Golinelli, Th. Jolicoeur, *$S = 2$ antiferromagnetic quantum spin chain*, *Phys. Rev. B* **54**, 4038 (1996).
- [61] S. Yamamoto, *Spin correlations and Haldane gap in $S = 2$ antiferromagnetic Heisenberg chain*, *Phys. Lett. A* **213**, 102 (1996).
- [62] S. Qin, S. Wang, L. Yu, *Universality class of integer quantum spin chains: $S = 2$ case study*, *Phys. Rev. B* **56**, 14251 (1997).
- [63] U. Schollwöck, *Marshall's sign rule and density-matrix renormalization-group acceleration*, *Phys. Rev. B* **58**, 8194 (1998).
- [64] Y. J. Kim, M. Greven, U. -J. Wiese, R. J. Birgeneau, *Monte-Carlo study of correlations in quantum spin chains at non-zero temperature*, *Eur. Phys. J. B* **4**, 291 (1998).
- [65] F. C. Alcaraz, A. Moreo, *Critical behavior of anisotropic spin- S Heisenberg chains*, *Phys. Rev. B* **46**, 2896 (1992).

- [66] X. Wang, S. Qin, L. Yu, *Haldane gap for the $S = 2$ antiferromagnetic Heisenberg chain revisited*, *Phys. Rev. B* **60**, 14529 (1999).
- [67] D. Eloy, F. B. Ramos, *Magnetic properties in an alternating-spin ferromagnetic Ising chain*, *J. Magn. Magn. Mater.* **323**, 1934 (2011).
- [68] T. M. Rice, S. Gopalan, M. Sigrist, *Superconductivity, spin gaps and Luttinger liquids in a class of cuprates*, *Europhys. Lett.* **23**, 445 (1993).
- [69] S. Gopalan, T. M. Rice, M. Sigrist, *Spin ladders with spin gaps: A description of a class of cuprates*, *Phys. Rev. B* **49**, 8901 (1994).
- [70] M. Sigrist, T. M. Rice, F. C. Zhang, *Superconductivity in a quasi-one-dimensional spin liquid*, *Phys. Rev. B* **49**, 12058.
- [71] M. Troyer, H. Tsunetsugu, D. Würtz, *Thermodynamics and spin gap of the Heisenberg ladder calculated by the look-ahead Lanczos algorithm*, *Phys. Rev. B* **50**, 13515 (1994).
- [72] Beat Frischmuth, Stephan Haas, German Sierra, T. M. Rice, *Low-energy properties of antiferromagnetic spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg ladders with an odd number of legs*, *Phys. Rev. B* **55**, 3340 (1997).
- [73] S. R. White, R. M. Noack, D. J. Scalapino, *Resonating valence-bond theory of coupled Heisenberg-chains*, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 886 (1994).
- [74] B. Frischmuth, B. Ammon, M. Troyer, *Susceptibility and low-temperature thermodynamics of spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg ladders*, *Phys. Rev. B* **54**, 3714 (1996).
- [75] K. G. Wilson, *Renormalization group - critical phenomena and Kondo problem*, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [76] J. W. Bray, S. T. Chui, *Computer renormalization-group calculations of $2k_F$ and $4k_F$ correlation functions of the one-dimensional Hubbard model*, *Phys. Rev. B* **19**, 4876 (1979).
- [77] C. Y. Pan, X. Chen, *Renormalization-group study of high-spin Heisenberg antiferromagnets*, *Phys. Rev. B* **36**, 8600 (1987).
- [78] S. R. White, *Numerical renormalization group for finite Hubbard lattices*, *Phys. Rev. B* **45**, 5752 (1992).
- [79] S. R. White, R. M. Noack, *Real-space quantum renormalization groups*, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3487 (1992).

- [80] U. Schollwöck, *The density-matrix renormalization group*, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 259 (2005).
- [81] K. Hallberg, *New Trends in Density Matrix Renormalization*, *Adv. Phys.* **55**, 477 (2006).
- [82] K. A. Hallberg, *Density-matrix algorithm for the calculation of dynamical properties of low-dimensional systems*, *Phys. Rev. B* **52**, R9827 (1995).
- [83] S. Ramasesha, S. K. Pati, H. R. Krishnamurthy, Z. Shuai, J. L. Brédas, *Low-lying electronic excitations and nonlinear optic properties of polymers via symmetrized density matrix renormalization group method*, *Synth. Met.* **85**, 1019 (1997).
- [84] T. D. Kühner, S. R. White, *Dynamical correlation functions using the density matrix renormalization group*, *Phys. Rev. B* **60**, 335 (1999).
- [85] E. Jeckelmann, *Dynamical density-matrix renormalization-group method*, *Phys. Rev. B* **66**, 045114 (2002).
- [86] M. Srednicki, *Entropy and area*, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 5, 666 (1993).
- [87] 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).
- [88] J. Eisert, M. Cramer, M. B. Plenio, *Colloquium: Area laws for the entanglement entropy*, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 277 (2010).
- [89] C. Holzhey, F. Larsen, F. Wilczek, *Geometric and renormalized entropy in conformal field theory*, *Nucl. Phys.* **B424**, 443 (1994).
- [90] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, A. Kitaev, *Entanglement in Quantum Critical Phenomena*, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).
- [91] P. Calabrese, J. Cardy, *Entanglement entropy and quantum field theory*, *J. Stat. Mech.* P06002 (2004).
- [92] J. C. Xavier, *A simple way to avoid metastable configurations in the density-matrix renormalization-group algorithms*, *Braz. J. Phys.* **39**, 596 (2009).
- [93] S. Liang, H. Pang, *Approximate diagonalization using the density matrix renormalization-group method: A two-dimensional-systems perspective*, *Phys. Rev. B* **49**, 9214 (1994).

- [94] S. R. White, *Spin Gaps in a Frustrated Heisenberg Model for CaV_4O_9* , *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3633 (1996).
- [95] P. Henelius, *Two dimensional infinite-system density-matrix renormalization group algorithm*, *Phys. Rev. B* **60**, 9561 (1999).
- [96] U. -J. Wiese, H. -P. Ying, *A determination of the low energy parameters of 2 - d Heisenberg antiferromagnet*, *Z. Phys. B* **33**, 147 (1994).
- [97] I. Affleck, D. Gepner, H. J. Schulz, T. Ziman, *Critical behaviour of spin-S Heisenberg antiferromagnetic chains: analytic and numerical results*, *J. Phys. A* **22**, 511 (1989).
- [98] I. Affleck, F. D. M. Haldane, *Critical theory of quantum spin chains*, *Phys. Rev. B* **36**, 5291 (1987).
- [99] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, H. Tasaki, *Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets*, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799 (1987).
- [100] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, H. Tasaki, *Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets*, *Commun. Math. Phys.* **115**, 477 (1988).
- [101] R. Feynman, *Statistical Mechanics: a Set of Lectures*, Frontiers in Physics: lecture Notes Series, 13 ed., Addison Wesley (1990).
- [102] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press (1986).
- [103] C. Lanczos Journal of research of the National Bureau of Standards, *An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators*, *Journal of research of the National Bureau of Standards* **45**, 255 (1950).
- [104] H. Fehske, R. Schneider, A. Weibe (Eds.) *Computational Many-Particle Physics*, Springer (2008).