

RAFAEL FREITAS PEREIRA COSTA

A cadeia XXZ desordenada

Uberlândia

2018

RAFAEL FREITAS PEREIRA COSTA

A cadeia XXZ desordenada

Trabalho de Conclusão de Curso realizado sob orientação do Dr. José Cândido Xavier e apresentado ao Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de bacharel em Física de Materiais

Uberlândia

2018

## Agradecimentos

- Aos meus pais, Simone Freitas Pereira Costa e Valteir Costa de Sousa, pelo descomunal aparato de amor, dedicação, aconselhamento, crédito, rigor e todos os melhores adjetivos que fizeram materializar, bem como todos melhores verbos que fizeram agir, projetando os degraus e ombros que fundamentalmente conduziram-me e conduzir-me-ão enquanto existir. É uma honra ser o filho desse casal de vencedores.
- Ao professor, diretor e *ditador* do Colégio DNA de Rio Verde-GO Hércules Moura Martins por, entre vários ensinamentos e benéficos que não se pode listar sucintamente, junto à equipe componente nos anos 2012-2013, despertar em mim o fascínio pelo conhecimento. Meu respeito e admiração por ele e pelos professores que tive nessa etapa divisora de águas em minha vida refletem, espero, na maneira como encarei os estudos e a vida desde então. O que me foi nutrido nesses anos com vocês, significou o mundo para mim. Muitíssimo obrigado.
- Ao Fabrício Zeferino, pela amizade e pela função de irmão-mais-velho-protetor que tão bem cumpriu quando mais necessitei. Grande a chance de que não fosse por ele, meu caminho seria diametralmente oposto. Uma pessoa feita de um bom coração, inteligência, muita fibra e toda generosidade desse mundo. Será, naturalmente, um engenheiro ambiental de marca maior.
- Ao Fernando Augusto, por me ser um exemplo de dedicação, esforço, superação, atitude e também, não com menos importância, pela amizade. “Tenha fé porque até no lixão nasce flor”: isso deve ter sido escrito pra você, meu chapa. Será, indubitavelmente, um engenheiro civil formidável.
- Ao meu orientador, Professor Dr. José Cândido Xavier, por toda solicitude, paciência, pela confiança em meu desempenho e por contribuir à minha formação científica de maneira tão fundamental. É com alegria e orgulho que o tenho como pai intelectual.
- À professora Liliana Sanz de la Torre por acreditar no meu potencial e sempre nutrir o entusiasmo científico, desde Física I até Mecânica Quântica II com minha turma. Obrigado, de coração.

- A todos os colegas e professores que permanentemente estimularam em mim o ensinar e aprender, propondo e discutindo problemas, seja explicando ou reclamando explicações, seja nas divagações espontâneas em horas diversas.
- A cada contribuinte que proporcionou o financiamento das bolsas que me fomentaram.
- Ao CNPq pelo direcionamento dos investimentos acima ressaltados.

*“Study hard what interests you the most in the most undisciplined, irreverent and original manner possible.”<sup>1</sup>*

**Richard Philips Feynman**

---

<sup>1</sup>Tradução livre: “Estude muito o que mais te interessa da maneira mais indisciplinada, irreverente e original possível.”

# Resumo

Investigamos a cadeia XXZ desordenada sob condições de contorno abertas (OBC, do inglês *Open Boundary Conditions*). No caso especial em que a anisotropia  $\Delta$  se anula (a cadeia XX), mapeamos a cadeia desordenada em uma cadeia de férmions livres (sem *spin*) com termos de *hopping* aleatórios. Isto nos permite investigar correlações dinâmicas e a entropia de emaranhamento (EE) para sistemas de tamanho  $L$  da ordem de centenas de sítios. O Grupo de Renormalização de Desordem Forte (SDRG, *Strong Disorder Renormalization Group*) é utilizado como ferramenta auxiliar na exploração do caso geral, cujo tratamento exato é até então desconhecido. Estudamos as correlações estáticas efetivas médias e obtemos decaimentos por lei de potência, característicos de sistemas críticos; encontramos ainda que a média da entropia de emaranhamento dos sistemas desordenados estudados escala logaritmicamente. Determinamos a carga central efetiva para vários casos de desordem e anisotropia, constatando sua universalidade no modelo para um intervalo  $-\frac{1}{2} < \Delta \leq 1$ .

Palavras-chave: Sistemas fortemente correlacionados, SDRG, modelo XXZ, desordem magnética, Entropia de Emaranhamento, sistemas críticos.

# Abstract

We investigate the disordered XXZ chain under open boundary conditions (OBC). In the particular case of vanishing anisotropy  $\Delta$  (the XX chain), we map the disordered chain into a (spinless) free-fermions chain with random hopping terms. This allows the investigation of dynamical correlations and of the entanglement entropy (EE) for systems with a size  $L$  in the order of hundreds of sites. The Strong Disorder Renormalization Group (SDRG) is utilized as a subsidiary tool for exploring the general case, whose exact treatment is yet unknown. We study the effective average static correlations and find power-law decays, characteristics of critical systems; we further learn that the mean EE of these random systems scales logarithmically. The effective central charge is determined for various realizations of disorder and anisotropy, highlighting its universality in the model for the interval  $-\frac{1}{2} < \Delta \leq 1$ .

Keywords: Strongly correlated systems, SDRG, XXZ model, magnetic disorder, Entanglement Entropy, critical systems.

# Lista de Figuras

1	Esquema ilustrando o processo de renormalização do SDRG para a cadeia dXX: os <i>spin's</i> adjacentes ao par ligado pelo maior acoplamento são efetivamente ligados através de $K_{eff}$ . . . . .	7
2	Representação pictórica de um sistema bipartido em que há acoplamentos entre sítios do subsistema $A$ (de tamanho $x$ ) e sítios do subsistema $B$ . Nesse caso, temos um estado $ \psi_{AB}\rangle \neq  \psi_A\rangle \otimes  \psi_B\rangle$ , i.e., emaranhado. Figura retirada da Ref. [13]. . . . .	15
3	$\log(C_{l=100,n}^{med})$ vs $\log(d)$ , sendo $d = n - l$ para a cadeia dXX de tamanho $L = 200$ . Nós calculamos as médias sob 5000 realizações de desordem. O círculo corresponde ao valor numérico e a linha sólida é o resultado do fit. A curva superior consiste em informação obtida exatamente, através da Eq. (61); a curva abaixo desta discrimina o resultado obtido através do SDRG. . . . .	31
4	Parte real da Transformada de Fourier no tempo de uma correlação que detém perfil típico dos dímeros de mais alta energia, como função da frequência $w$ . A realização-exemplo é de uma cadeia dXX de tamanho $L = 200$ . . . . .	32
5	Parte real da Transformada de Fourier no tempo de uma correlação que detém perfil típico dos dímeros de energia intermediária, como função da frequência $w$ . A realização-exemplo é de uma cadeia dXX de tamanho $L = 200$ . . . . .	33
6	Parte real da Transformada de Fourier no tempo de uma correlação que detém perfil típico dos dímeros de mais baixa energia, como função da frequência $w$ . A realização-exemplo é de uma cadeia dXX de tamanho $L = 150$ . . . . .	33
7	Valor médio da entropia de emaranhamento como função do tamanho do subsistema $A$ para a cadeia dXX de tamanho $L = 120$ . A média foi calculada sob 5000 realizações de desordem. (a) Resultado obtido via diagonalização exata (matriz correlação); (b) Resultados do SDRG. . . . .	35
8	$\log(C(d))$ vs $\log(d)$ para a cadeia dXXX de tamanho $L = 200$ . Calculamos as médias por meio do SDRG sob 10000 realizações. O círculo corresponde ao valor numérico e a linha sólida é a expressão obtida por ajuste. . . . .	37



- 9  $\log(C(d))$  vs  $\log(d)$  para a cadeia dXXZ de tamanho  $L = 500$ . Calculamos as médias por meio do SDRG sob 5000 realizações. O círculo corresponde ao valor numérico e a linha sólida é a expressão obtida por ajuste. . . . 37
- 10 Valor médio da entropia de emaranhamento como função do tamanho do subsistema  $A$  para a cadeia dXXZ de tamanho  $L = 1000$ . A média foi calculada sob 5000 realizações de desordem. Resultado obtido via SDRG. . 38

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>O SDRG</b>	<b>4</b>
2.1	Renormalização . . . . .	4
2.2	Previsões do SDRG . . . . .	8
2.2.1	Correlação . . . . .	8
2.2.2	Entropia de Emaranhamento . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Cadeia dXX - tratamento exato</b>	<b>16</b>
3.1	Diagonalização . . . . .	16
3.1.1	Fermionização . . . . .	16
3.1.2	Obtenção do espectro . . . . .	19
3.2	Correlações . . . . .	22
3.3	Entropia de Emaranhamento - o método da matriz correlação . . . . .	25
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>30</b>
4.1	A cadeia dXX . . . . .	30
4.1.1	Correlações estáticas . . . . .	30
4.1.2	Correlações dinâmicas . . . . .	32
4.1.3	A Entropia de Emaranhamento . . . . .	34
4.2	A cadeia dXXZ . . . . .	36
4.2.1	Correlações . . . . .	36
4.2.2	Entropia . . . . .	38
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>40</b>

# 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 à 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*, que 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. Foram Mott e Peierls alguns dos primeiros a sugerir que uma forte interação Coulombiana entre os elétrons poderia dar origem ao comportamento isolante. Neste caso dizemos que o sistema é fortemente correlacionado.

Um dos exemplos mais célebres de modelos fortemente correlacionados é a cadeia XXZ de spin-1/2 cuja Hamiltoniana é dada por [1]

$$\hat{H}(K_1, K_2, \dots, K_L, \Delta) = \sum_{i=1}^{L-1} \frac{K_i}{4} \left( \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right) + \hat{H}_s, \quad (1)$$

sendo  $\sigma^x$ ,  $\sigma^y$  e  $\sigma^z$  as matrizes de Pauli (veja Apêndice A),  $\Delta$  a anisotropia e  $K_i$  o termo de interação entre os *spin* nos sítios  $i$  e  $i + 1$  da cadeia de tamanho  $L$ . Consideraremos o termo de superfície dado por

$$\hat{H}_S = \hat{H}_S(\phi) = \frac{K_L}{4} [\cos\phi (\sigma_L^x \sigma_1^x + \sigma_L^y \sigma_1^y) + \sin\phi (\sigma_L^x \sigma_1^y - \sigma_L^y \sigma_1^x) + \Delta (\sigma_L^z \sigma_1^z)]. \quad (2)$$

Note que esse termo descreve condições periódicas de contorno (PBC<sup>2</sup>) se  $\phi = 0$  e anti-periódicas (APBC<sup>3</sup>) para  $\phi = \pi$ . Nas condições abertas de contorno, tomamos  $\hat{H}_S = 0$ .

A física de baixas energias do caso puro/limpo,  $K_i = K \forall i$ , é relativamente bem entendida devido ao fato que o modelo pode ser exatamente solucionado via o método de ansatz de Bethe [2] e pelo mesmo ser descrito por um líquido de Luttinger [3]. Em particular, é bem conhecido que as funções de correlações estáticas comportam-se, assintoticamente,

---

<sup>2</sup>*Periodic Boundary Conditions*

<sup>3</sup>*Antiperiodic Boundary Conditions*

como [3]

$$\langle \sigma_i^z \sigma_{i+l}^z \rangle = \frac{(-1)^l A}{l^\eta} - \frac{1}{4\pi^2 \eta l^2},$$

sendo o expoente  $\eta = 1 - \frac{\arccos(\Delta)}{\pi}$  e  $A$  uma constante. O caso em que  $\Delta = 0$  (a cadeia XX) é interessante pois pode-se obter vários resultados exatos mapeando-se a cadeia XX em uma cadeia de Férmions livres via transformação de Jordan-Wigner [1, 4]. Alguns deste resultados serão apresentados no capítulo 3.

Vale mencionar que impurezas ou imperfeições na rede cristalina aparecem com frequência em materiais. Desta forma, se faz necessário entender qual o efeito das impurezas/imperfeições da rede cristalina na física do problema. Com isto em mente, neste trabalho pretendemos considerar o efeito da desordem magnética, isto é, impurezas que alteram a interação magnética entre íons na cadeia XXZ. Para tanto, exigiremos que os coeficientes  $K_i$  comportem-se como variáveis aleatórias  $0 < K_i < 1$ , distribuídas de acordo com  $P(K) = \alpha K^{(\alpha-1)}$ . Essa distribuição é conveniente porque podemos sintonizar o grau de desordem através da potência  $\alpha > 0$  [5]. Como ferramenta auxiliar no estudo de sistemas desordenados, empregaremos ainda o Grupo de Renormalização de Desordem Forte (SDRG) [5, 6, 7], descrito no capítulo 2.

Nosso estudo gravita em torno das seguintes quantidades:

- Funções correlação do tipo

$$C_{n,l}(t) = \langle \Psi | S_n^z(t) S_l^z(0) | \Psi \rangle, \quad (3)$$

sendo  $|\Psi\rangle$  o estado fundamental do respectivo hamiltoniano e  $S_n^z(t) = e^{iHt} S_n^z(0) e^{-iHt}$ , ou seja, a evolução temporal<sup>4</sup> do operador  $S_n^z(t)$ . A transformada de Fourier no espaço e no tempo dessa grandeza é chamada função espectral e pode ser medida experimentalmente via espalhamento de nêutrons [8].

- Cálculo da entropia de emaranhamento (EE) para um subsistema  $A$  de *spin*, sendo que o subsistema, ou bloco  $A$  tem o tamanho  $l < L$ . Essa entropia é definida a partir da matriz densidade reduzida [9].

$$S \equiv -Tr [\rho_A \log(\rho_A)], \quad (4)$$

---

<sup>4</sup>Utilizamos unidades em que  $\hbar = 1$ .

sendo  $\rho_A = \text{Tr}_B(\rho_{AB})$  a matriz densidade reduzida do subsistema  $A$  e estamos utilizando  $\log$  como a função logaritmo na base  $e$ . Com isso é possível também sondar a ocorrência de comportamentos universais [10, 11, 12, 13].

Ressaltamos que há na natureza várias realizações experimentais de sistemas *quasiunidimensionais*. O estudo é justificado não apenas do ponto de vista básico, mas também pela atualíssima realidade em que a manipulação de átomos individuais em sistemas de baixa dimensão é possível mediante redes ópticas [8, 14].

Este trabalho está apresentado na seguinte forma: No capítulo 2 apresentaremos o algoritmo do Grupo de Renormalização de desordem forte, em particular mostraremos como determinar funções correlações e a entropia de emaranhamento por este método. No capítulo 3 focaremos na cadeia XX, a qual pode ser investigada exatamente. No capítulo 4 apresentamos os nossos resultados. Finalmente, no capítulo 5 expomos nossas conclusões.

## 2 O SDRG

Resolver um problema de muitos corpos de maneira exata, analiticamente, é quase sempre impossível. Isso não significa que estamos impossibilitados de poder *dizer algo* a respeito da natureza de tais sistemas; muita vez, como a Mecânica Estatística iniciada por Boltzmann<sup>5</sup> e formalizada por Gibbs<sup>6</sup> nos ensinou, a presença de várias partículas resulta em novos padrões coletivos que podemos reconhecer, tratar e então construir uma descrição e submetê-la à experiência.

Grande parte do esforço em Física da Matéria Condensada é na criação de métodos que sirvam para uma boa descrição da física regida por fenômenos coletivos, apesar da não disponibilidade de soluções analíticas exatas. É neste ínterim que a utilidade de um processo de **renormalização** se encontra. É possível obter uma ideia geral do sistema, desde que - *a priori* - os detalhes “microscópicos” não sejam tão importantes, construindo uma **cópia** do problema original. Esperançosamente, a cópia será simples o suficiente para abordarmos o **hamiltoniano efetivo** em mãos e extrair dados relevantes, mas não simplista a ponto de que os dados estejam em desacordo com a experiência mesmo qualitativamente.

### 2.1 Renormalização

Primeiramente, discutimos e obtemos o procedimento geral de renormalização baseado no *Strong Disorder Renormalization Group (SDRG)* [5, 7] para a cadeia dXXZ<sup>7</sup>, antiferromagnética com anisotropia  $\Delta$ , sob OBC. Sabe-se que física de baixas energias desses sistemas no limite termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ) é descrita pela *Random Singlet Phase (RSP)*, ou

<sup>5</sup>“**Ludwig Eduard Boltzmann** (Viena, 20 de fevereiro de 1844 — Duino-Aurisina, 5 de setembro de 1906) foi um físico austríaco, conhecido pelo seu trabalho no campo da termodinâmica estatística. É considerado junto com Josiah Willard Gibbs e James Clerk Maxwell como o fundador da mecânica estatística. Foi defensor da teoria atômica, numa época em que esta ainda era bem controversa.” (Descrição da Wikipedia: [pt.wikipedia.org/wiki/Ludwig\\_Boltzmann](https://pt.wikipedia.org/wiki/Ludwig_Boltzmann) [pt.wikipedia.org/wiki/Ludwig\\_Boltzmann](https://pt.wikipedia.org/wiki/Ludwig_Boltzmann). Acesso em 10/11/2018.)

<sup>6</sup>“**Josiah Willard Gibbs** (New Haven, 11 de fevereiro de 1839 — New Haven, 28 de abril de 1903) foi um cientista americano que realizou importantes contribuições teóricas na física, química e matemática. Seu trabalho sobre as aplicações da termodinâmica contribuiu para transformar a química física em uma ciência dedutiva rigorosa. Junto com James Clerk Maxwell e Ludwig Boltzmann, criou a mecânica estatística (um termo que ele cunhou), explicando as leis da termodinâmica como consequências das propriedades estatísticas de grandes *agregados* de partículas.” (Descrição da Wikipedia: [pt.wikipedia.org/wiki/Josiah\\_Willard\\_Gibbs](https://pt.wikipedia.org/wiki/Josiah_Willard_Gibbs) [pt.wikipedia.org/wiki/Josiah\\_Willard\\_Gibbs](https://pt.wikipedia.org/wiki/Josiah_Willard_Gibbs). Acesso em 10/11/2018.)

<sup>7</sup>As cadeias XX e XXZ desordenadas serão denotadas dXX e dXXZ respectivamente.

Fase de Singletos Aleatórios, desde que a anisotropia se encontre no intervalo  $-\frac{1}{2} < \Delta \leq 1$ , para qualquer  $0 \leq \alpha < \infty$ . Passamos então ao cálculo da correlação dada pela Eq. (3), por meio do estado fundamental aproximado e do hamiltoniano efetivo.

Considere o hamiltoniano

$$\hat{H}_{XXZ} = \sum_{i=1}^{L-1} \frac{K_i}{4} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z). \quad (5)$$

A idéia principal do SDRG é obter uma descrição da física de baixas energias eliminando os graus de liberdade associados com as energias mais altas através de uma renormalização, a qual descrevemos abaixo.

Suponha que inicialmente a configuração de acoplamentos de uma cadeia de  $L$  sítios seja  $(\dots, K_l, K_m, K_r, \dots)_L$  sendo  $K_m$  o maior acoplamento desta distribuição arbitrária. Obter-se-á um Hamiltoniano efetivo, abordando o sistema perturbativamente. Seja  $H_0$  o hamiltoniano que descreve o par de spins com acoplamento  $K_m$

$$H_0 = \frac{K_m}{4} (\sigma_m^x \sigma_{m+1}^x + \sigma_m^y \sigma_{m+1}^y + \Delta \sigma_m^z \sigma_{m+1}^z),$$

e  $W$  uma perturbação, associada com a interação dos sítios com seus vizinhos próximos, i.e.,

$$W = \frac{K_l}{4} (\sigma_{m-1}^x \sigma_m^x + \sigma_{m-1}^y \sigma_m^y + \Delta \sigma_{m-1}^z \sigma_m^z) + \frac{K_r}{4} (\sigma_{m+1}^x \sigma_{m+2}^x + \sigma_{m+1}^y \sigma_{m+2}^y + \Delta \sigma_{m+1}^z \sigma_{m+2}^z), \quad (6)$$

sendo  $\sigma_k^x = \frac{1}{2} (\sigma_k^+ + \sigma_k^-)$  e  $\sigma_k^y = \frac{1}{i2} (\sigma_k^+ - \sigma_k^-)$  [veja o Apêndice A].

Denotamos  $|0\rangle = \frac{|\uparrow_m \downarrow_{m+1}\rangle - |\downarrow_m \uparrow_{m+1}\rangle}{\sqrt{2}}$ ,  $|1\rangle = |\uparrow_m \uparrow_{m+1}\rangle$ ,  $|2\rangle = \frac{|\uparrow_m \downarrow_{m+1}\rangle + |\downarrow_m \uparrow_{m+1}\rangle}{\sqrt{2}}$  e  $|3\rangle = |\downarrow_m \downarrow_{m+1}\rangle$  os autoestados de  $H_0$  com energias  $E_0 = -\frac{K_m}{2}(1 + \frac{\Delta}{2})$ ,  $E_1 = \frac{K_m}{4}\Delta$ ,  $E_2 = \frac{K_m}{2}(1 - \frac{\Delta}{2})$  e  $E_3 = \frac{K_m}{4}\Delta$  respectivamente. Note que as energias  $E_1$  e  $E_3$  são iguais, o que caracteriza um subespaço duplamente degenerado; se  $\Delta = 1$ , temos os estados  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  e  $|3\rangle$  constituindo um tripleto. Entretanto, não será necessário utilizar o aparato da teoria de perturbação degenerada, desde que  $-1 < \Delta$  pois nesse intervalo o estado fundamental é não degenerado. Ademais, defina  $S_{T_0}^z = \sum_{j=m}^{m+1} \frac{1}{2} \sigma_j^z$ . Então  $S_{T_0}^z |1\rangle = |1\rangle$ ,  $S_{T_0}^z |3\rangle = |3\rangle$  e  $S_{T_0}^z |2\rangle = 0 |2\rangle$ . Uma vez que  $[H_0, S_{T_0}^z] = 0$ ,  $|1\rangle$ ,  $|2\rangle$  e  $|3\rangle$  permanecem bons estados para o problema [9].

O Hamiltoniano efetivo será, portanto, o operador energia corrigido até segunda ordem

$$H_{eff} = H_0 + \langle 0|W|0\rangle + \sum_{j=1}^3 \frac{|\langle 0|W|j\rangle|^2}{E_0 - E_j},$$

sendo importante notar que a teoria de perturbação é aqui conduzida de maneira tal a projetar a perturbação  $W$  em um subespaço, isto é, os “valores esperados” calculados não retornam quantidades escalares, mas operadores.

É fácil ver que  $\langle 0|W|0\rangle = 0$ ; por linearidade, as alterações (*spin-flip* ou excitação magnética longitudinal devido a  $S^z$ ) nos sítios  $m$  e  $m + 1$  resultam sempre em estados ortogonais ao singlete. Na verdade, podemos interpretar essa anulação fisicamente: devido ao efeito de desordem magnética, em uma primeira ordem os *spin* não interagem entre si, visto que para  $\alpha \rightarrow 0^+$ , ou seja, desordem infinita, têm-se os acoplamentos também tendendo a zero, donde a correção de primeira ordem anula-se. Obtemos

$$H_{eff}(\Delta) = H_0 - \frac{1}{K_m} |\langle 0|W|2\rangle|^2 - \frac{2}{K_m(1+\Delta)} \sum_{j=\{1,3\}} |\langle 0|W|j\rangle|^2. \quad (7)$$

Através dos resultados auxiliares

$$\langle 0|W|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} (K_l \sigma_{m-1}^+ - K_r \sigma_{m+2}^+),$$

$$\langle 0|W|2\rangle = -\frac{\Delta}{8} (K_l \sigma_{m-1}^z - K_r \sigma_{m+2}^z),$$

$$\langle 0|W|3\rangle = -\frac{1}{\sqrt{8}} (K_l \sigma_{m-1}^- - K_r \sigma_{m+2}^-),$$

conclui-se que

$$|\langle 0|W|1\rangle|^2 = \frac{1}{8} [K_l^2 (\sigma_{m-1}^+ \sigma_{m-1}^-) + K_r^2 (\sigma_{m+2}^+ \sigma_{m+2}^-) - K_l K_r (\sigma_{m-1}^+ \sigma_{m+2}^- + h.c.)], \quad (8)$$

$$|\langle 0|W|2\rangle|^2 = \frac{\Delta^2}{16} (K_l^2 + K_r^2 - 2K_l K_r \sigma_{m-1}^z \sigma_{m+2}^z), \quad (9)$$

em que foi utilizado o fato  $(\sigma^z)^2 = I$ , sendo  $I$  o operador identidade, e que

$$|\langle 0|W|3\rangle|^2 = \frac{1}{8} [K_l^2 (\sigma_{m-1}^- \sigma_{m-1}^+) + K_r^2 (\sigma_{m+2}^- \sigma_{m+2}^+) - K_l K_r (\sigma_{m-1}^- \sigma_{m+2}^+ + h.c.)]. \quad (10)$$



Inserindo os resultados acima na Eq. (7) e utilizando das identidades  $\{\sigma^+, \sigma^-\} = I$  e  $\sigma_{m-1}^+ \sigma_{m+2}^- + h.c. = \frac{1}{2} (\sigma_{m-1}^x \sigma_{m+2}^x + \sigma_{m-1}^y \sigma_{m+2}^y)$ , obtemos

$$H_{eff}(\Delta) = H_0 + \tilde{E}_0(\Delta) + \frac{K_l K_r}{K_m (1 + \Delta)} \left[ \frac{1}{4} \left( \sigma_{m-1}^x \sigma_{m+2}^x + \sigma_{m-1}^y \sigma_{m+2}^y + \frac{\Delta^2 (1 + \Delta)}{2} \sigma_{m-1}^z \sigma_{m+2}^z \right) \right], \quad (11)$$

em que definimos  $\tilde{E}_0(\Delta) = -\frac{K_l^2 + K_r^2}{K_m 8} \left( \frac{2}{1 + \Delta} + \frac{\Delta^2}{2} \right)$ . Note que se  $\Delta = 1$ , o que fornece a cadeia dXXX, o Hamiltoniano efetivo é dado por

$$H_{eff}(1) = H_0 + \tilde{E}_0(1) + \frac{K_l K_r}{2K_m} \vec{S}_{m-1} \cdot \vec{S}_{m+2}, \quad (12)$$

e se  $\Delta = 0$ , a cadeia dXX, temos

$$H_{eff}(0) = H_0 + \tilde{E}_0(0) + \frac{K_l K_r}{K_m} \vec{S}_{m-1} \cdot \vec{S}_{m+2}. \quad (13)$$

Vemos então que é possível construir uma hamiltoniana efetiva eliminando os graus de liberdade associados com  $H_0$  e devido a este fato surge um acoplamento efetivo e uma anisotropia efetiva entre os *spins*  $m - 1$  e  $m + 2$ , dados por

$$\frac{K_l K_r}{K_m (1 + \Delta_m)} = K_{eff} \quad (14)$$

$$\frac{\Delta_l \Delta_r (1 + \Delta_m)}{2} = \Delta_{eff}. \quad (15)$$

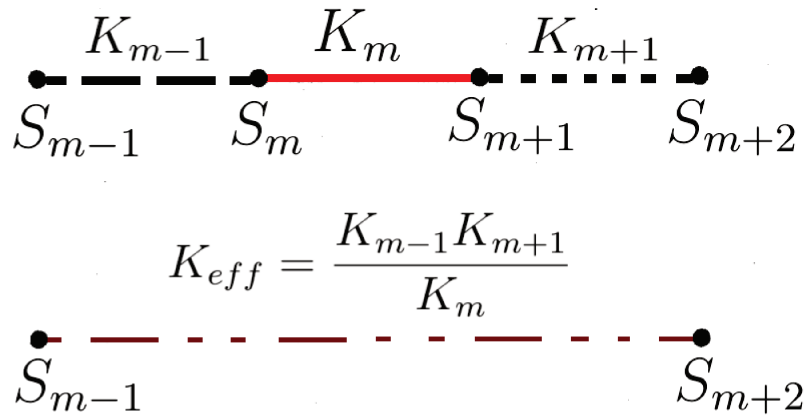


Figura 1: Esquema ilustrando o processo de renormalização do SDRG para a cadeia dXX: os *spin*'s adjacentes ao par ligado pelo maior acoplamento são efetivamente ligados através de  $K_{eff}$ .

Findo este procedimento, renormalizamos o sistema para uma cadeia com  $L-2$  sítios e um singlete isolado. Agora obtém-se uma configuração do tipo  $(\dots, K_{m-2}, K_{eff}, K_{m+3}, \dots)_{L-2}$ . Observamos também que o aparecimento de anisotropias renormalizadas de acordo com Eq. (15) mostra que o critério mais geral para determinar os dímeros de altas energias é, na verdade, observar a energia necessária para levar um singlete ao primeiro estado excitado  $|2\rangle$  para a região de valores  $\Delta$  considerada. Na Fig. 1 ilustramos o procedimento de renormalização obtido pela teoria de perturbação, em particular para uma cadeia dXX. O algoritmo é executado até que o hamiltoniano efetivo final seja uma soma de dímeros isolados, isto é, de termos do tipo  $H_0$ . Notamos que os pontos fixos na renormalização da anisotropia são  $\Delta = \{0, 1\}$ , que se  $\Delta < 1$  tem-se anisotropia efetiva se aproximando de zero e para  $\Delta > 1$  ela tende a divergir: esses comportamentos extremos são mais nítidos para os acoplamentos efetivos de longa distância, visto que estes surgem em situações nas quais um mesmo par de *spins* está adjacente ao maior acoplamento em vários passos do algoritmo.

## 2.2 Previsões do SDRG

O estado fundamental e o hamiltoniano efetivo, com suas estruturas radicalmente mais simples do que aquela do problema original, permite-nos obter as correlações e a EE [ver Eqs. (3) e (4)] de forma fechada, conforme mostraremos nas subseções 2.2.1 e 2.2.2 a seguir. Adiante, no capítulo 3, derivamos as correlações e a EE para a cadeia dXX de forma exata, o que fornece comparativos e, portanto, como referência para a eficácia do SDRG em abordar os sistemas aqui estudados.

### 2.2.1 Correlação

Desejamos agora calcular as correlações

$$C_{k,j}^{SDRG}(t) = \langle \mathcal{Y} | S_k^z(t) S_j^z(0) | \mathcal{Y} \rangle, \quad (16)$$

sendo  $S_k^z(t) = e^{iH_{eff}t} S_k^z(0) e^{-iH_{eff}t}$ ,  $H_{eff} = \sum_{n=1}^{L/2} \frac{K_{f(n)}}{4} \left( \sigma_{f(n)}^x \sigma_{g(n)}^x + \sigma_{f(n)}^y \sigma_{g(n)}^y + \Delta_{f(n)} \sigma_{f(n)}^z \sigma_{g(n)}^z \right)$ ; os coeficientes  $K_{f(n)}$  e  $\Delta_{g(n)}$  são dados pelo SDRG conforme discutido na seção anterior. Os índices  $f(n)$  e  $g(n)$  são funções bijetivas aleatórias, decorrente do SDRG. Denotemos

$D_\phi$  e  $Im_\phi$  o domínio e a imagem, respectivamente, da função  $\phi$ . As funções  $f$  e  $g$ , acima introduzidas, gozam das propriedades

1.  $D_f = D_g = \{1, 2, \dots, L/2\} = D$ , visto que o hamiltoniano efetivo tem tamanho  $\frac{L}{2}$ ,
2.  $Im_f \cap Im_g = \{\}$ , pois nenhum *spin* constitui dímero consigo mesmo, e
3.  $Im_f \cup Im_g = \{1, 2, 3, \dots, L\}$ , posto que os sítios componentes originam de uma cadeia com tamanho  $L$ .

Note que o cálculo de  $C_{k,n}(t)$  envolve o hamiltoniano original [veja Eqs. (1), (2) e (3)]; aqui desejamos verificar se o SDRG consegue descrever corretamente o comportamento de  $C_{k,n}(t)$  para o caso  $\Delta = 0$ . Para tanto, vamos comparar  $C_{k,n}(t)$  e  $C_{k,n}^{SDRG}(t)$ , uma vez que a cadeia dXX pode ser resolvida de forma exata.

O estado fundamental, conforme discutido anteriormente, é dado por

$$|\mathcal{Y}\rangle = \prod_{n=1}^{\frac{L}{2}} \otimes |s_{f(n),g(n)}\rangle, \quad (17)$$

sendo

$$|s_{i,j}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_i \downarrow_j\rangle - |\downarrow_i \uparrow_j\rangle). \quad (18)$$

A fim de calcular  $C_{k,n}^{SDRG}(t)$  note primeiro que

$$\langle \mathcal{Y} | e^{iHt} = \langle \mathcal{Y} | e^{iE_0 t}, \text{ sendo } E_0 \text{ a energia do autoestado } |\mathcal{Y}\rangle.$$

Note ainda que, sem perda de generalidade, se  $j \in Im_f$  e  $f(l) = j$  para algum  $l$ , então

$$S_j^z |\mathcal{Y}\rangle = S_j^z |s_{f(1),g(1)}\rangle \otimes \dots \otimes |s_{j,g(l)}\rangle \otimes \dots \otimes |s_{f(\frac{L}{2}),g(\frac{L}{2})}\rangle,$$

usando o fato que

$$S_j^z |s_{j,g(l)}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} (|\uparrow_j \downarrow_{g(l)}\rangle + |\downarrow_j \uparrow_{g(l)}\rangle) = \frac{1}{2} |s_{j,g(l)}^\uparrow\rangle,$$

obtemos

$$S_j^z |\mathcal{Y}\rangle = \frac{1}{2} \left( \prod_{m \neq i}^{\frac{L}{2}} \otimes |s_{f(m),g(m)}\rangle \right) \otimes |s_{j,g(i)}^\uparrow\rangle.$$

Seja  $-s_0$  a energia do singlete  $|s_{j,g(l)}\rangle$ . Uma vez que a energia do estado  $|s_{j,g(i)}^\uparrow\rangle$  é

$-s_0 + K_j$ , temos então

$$e^{-iHt} S_j^z |\Upsilon\rangle = e^{-it(E_0 - (-s_0) + (-s_0 + K_j))} S_j^z |\Upsilon\rangle = e^{-it(E_0 + K_j)} S_j^z |\Upsilon\rangle,$$

em que no passo intermediário explicitamos a subtração da energia do singlete e adição da energia do estado  $|s_{j,g(i)}^\uparrow\rangle$ . Finalmente,

$$C_{k,j}^{SDRG}(t) = e^{-iK_j t} \langle \Upsilon | S_k^z S_j^z | \Upsilon \rangle.$$

Além da autocorrelação, temos essencialmente duas possibilidades:

1.  $k = g(j)$
2.  $k \neq j$  e  $k \neq g(j)$ .

O primeiro caso, como é fácil ver, retorna

$$C_{k,j}^{SDRG}(t) = -\frac{1}{4} e^{-iK_j t},$$

uma vez que os dímeros são indexados pelo par  $(f(j), g(j))$ .

A segunda possibilidade resulta sempre zero, dado que no valor esperado final o termo  $\langle s_{j,g(i)} | s_{j,g(i)}^\uparrow \rangle = 0$  aparecerá no produto escalar<sup>8</sup>, então temos correlação nula.

Desse modo, podemos escrever o resultado final genérico

$$C_{k,j}^{SDRG}(t) = \frac{1}{4} e^{-iK_j t} (\delta^{g(j),k} + \delta^{k,j}) (1 - 2\delta^{k,j}). \quad (19)$$

Conforme já mencionado, iremos comparar as correlações  $C_{k,j}^{SDRG}(t)$  com os resultados exatos, a fim de verificar quão boa é a aproximação de desordem forte para o modelo dXX.

Uma grandeza relacionada a um observável físico para estudos via espalhamento é a seção de choque. A Função Espectral do problema, ou Fator de Estrutura Dinâmico, isto é, a Transformada de Fourier espaço-temporal da correlação dinâmica, está relacionada a esse observável. O espalhamento de nêutrons é frequentemente empregado no estudo de propriedades dinâmicas em sistemas magnéticos. Nota-se, portanto, que as frequências de

---

<sup>8</sup> $g(j)$  é o valor distinto de  $k$  para o qual temos pareamento com  $j$ , conforme o SDRG.

ressonância esperadas são exatamente os acoplamentos efetivos entre dímeros, podendo ser estudadas a partir da transformada temporal.

### 2.2.2 Entropia de Emaranhamento

A Mecânica Quântica pode ser formulada sob diversas roupagens, consistentes e equivalentes, mais ou menos práticas e eficientes para as mais distintas classes de problemas. Uma dessas formulações é baseada no uso de operadores densidade para descrição dos estados de um sistema. Particularmente, visto que se objetiva quantificar o grau de emaranhamento da cadeia dXXZ, trata-se de ferramenta muito útil. Referenciamos a excelente obra [9] para uma introdução aos operadores densidade, matriz densidade reduzida, à decomposição de Schmidt bem como várias aplicações desse formalismo poderosíssimo.

A entropia de emaranhamento<sup>9</sup> (EE) é definida, para um sistema bipartido, com sub-sistemas  $A$  e  $B$  conforme Eq. (4)

$$S \equiv -Tr [\rho_A \log (\rho_A)].$$

Para os sistemas críticos unidimensionais e invariantes conforme [10] a E.E. do estado fundamental se comporta como [11, 12, 13]

$$S(L, l) = \frac{c}{3\eta} \log \left[ \frac{\eta L}{\pi} \sin \left( \frac{\pi l}{L} \right) \right] + \frac{c_1}{\eta} - (1 - \eta) s_b.$$

Sendo  $s_b$  a entropia de fronteira [15, 16],  $c_1$  uma constante não universal e  $\eta = 2$  para um sistema com condições abertas de contorno (OBC), no limite termodinâmico com  $l$  finito, temos

$$S(l) \sim \frac{c}{3\eta} \log (\eta l) + \frac{c_1}{\eta} - (1 - \eta) s_b.$$

Embora os sistemas desordenados não sejam invariantes conformes, é observado também uma violação da lei de área entrópica nestes sistemas [5, 15, 16, 17, 18]. Neste caso, o quociente que vai na frente do termo logaritmo é denotado carga central efetiva  $c_{eff}$ . Tendo em mãos a estrutura de singletos gerada no processo de decimação do grupo de renormalização de desordem forte, podemos calcular facilmente a carga efetiva [5].

O estado fundamental aproximado obtido pelo SDRG para a cadeia dXXZ estudada se trata de um conjunto de singletos isolados, conforme vimos na seção anterior. Podemos

---

<sup>9</sup>A EE também é conhecida como entropia de von Neumann.

assim escrever o operador densidade do sistema  $AB$  bipartido como

$$\rho_{AB} = |\mathcal{T}\rangle \langle \mathcal{T}| = \prod_{j=1}^{L/2} \otimes \rho_{f(j),g(j)},$$

sendo

$$\rho_{f(j),g(j)} = |s_{f(j),g(j)}\rangle \langle s_{f(j),g(j)}|,$$

com  $f$  e  $g$  funções aleatórias decorrentes do SDRG cujas propriedades são aquelas descritas na seção 2.1 e  $|s_{f(j),g(j)}\rangle$  o estado singleto (veja Eq. (18)),

A matriz densidade reduzida para o subsistema A é dada por

$$\rho_A = Tr_B \rho_{AB},$$

e a operação traço parcial, denotada  $Tr_B$ , a qual soma sobre os graus de liberdade do sistema B.

Logo,

$$\rho_A = \prod_{j=1}^{L/2} Tr_B \rho_{f(j),g(j)}.$$

Por definição, podemos notar que<sup>10</sup>

$$Tr_B \rho_{f(j),g(j)} = \frac{1}{2} \left( |\uparrow_{g/f}\rangle \langle \uparrow_{g/f}| + |\downarrow_{g/f}\rangle \langle \downarrow_{g/f}| \right), \quad (20)$$

se  $f \in B$  mas  $g \notin B$  e vice-versa.

Ademais,

$$Tr_B \rho_{f(j),g(j)} = \begin{cases} 1, & \text{se } f(j) \text{ e } g(j) \in B \\ \rho_{f(j),g(j)}, & \text{se } f(j) \text{ e } g(j) \notin B \end{cases}. \quad (21)$$

Utilizando a definição de EE, temos

$$S = -Tr \left[ \prod_{m=1}^{L/2} Tr_B \rho_{f(m),g(m)} \sum_{m=1}^{L/2} \log \left[ Tr_B \rho_{f(m),g(m)} \right] \right],$$

e podemos ver que se  $f(m)$  e  $g(m)$  pertencem ao subsistema B, a contribuição do traço parcial é zero devido ao termo logaritmo. Denotando as funções que extraem o traço por

<sup>10</sup>A notação  $g/f$  significa que o índice poderia ser  $g$  ou  $f$ .

$|\Psi_k\rangle = \prod_{l=1}^{\dim(A)} \otimes |u_l^k\rangle$ <sup>11</sup>, sendo possível naturalmente que  $u_l^k$  assumam  $\uparrow$  ou  $\downarrow$ , então

$$S = -\sum_j \sum_k \langle \Psi_k | \overline{\prod}_m Tr_{B\rho_{f(m)g(m)}} \log [Tr_{B\rho_{f(j)g(j)}}] | \Psi_k \rangle,$$

em que utilizamos a notação de barra<sup>12</sup> sobre o somatório e o produtório, a fim de indicar restrição; no caso, restringimos às contribuições não-nulas para S.

Veja que, se f e g pertencem a A, então

$$Tr_{B\rho_{f(j)g(j)}} = \frac{1}{2} \left( |\uparrow_{f(j)\downarrow_{g(j)}}\rangle - |\downarrow_{f(j)\uparrow_{g(j)}}\rangle \right) \left( \langle \uparrow_{f(j)\downarrow_{g(j)}} | - \langle \downarrow_{f(j)\uparrow_{g(j)}} | \right),$$

e dessa forma

$$\log [Tr_{B\rho_{f(j)g(j)}}] | \Psi_k \rangle = \mp | \Psi_k \rangle \log(2),$$

pois nas funções  $|\Psi_k\rangle$  ambos os termos  $|\uparrow_{f(j)\downarrow_{g(j)}}\rangle$  e  $|\downarrow_{f(j)\uparrow_{g(j)}}\rangle$  aparecem no produto direto que a compõe. Como os sinais estão trocados e o traço pega ambas as contribuições, segue que, na verdade, os únicos possíveis termos não-nulos da EE são devido aos cruzamentos, isto é, quando um sítio  $f(j)[g(j)]$  está no subsistema A e o sítio-par  $g(j)[f(j)]$  em B. Para encontrar essas contribuições, conforme Eq. (20), observe que

$$\log \left[ \frac{1}{2} \left( |\uparrow_{f/g}\rangle \langle \uparrow_{f/g}| + |\downarrow_{f/g}\rangle \langle \downarrow_{f/g}| \right) \right] | \Psi_k \rangle = \left( \prod_{l \neq f/g}^{\dim(A)} \otimes |u_l^k\rangle \right) \otimes \log \left[ \frac{1}{2} |v\rangle \right],$$

em que  $|v\rangle = |\uparrow_{f/g}\rangle$  ou  $|v\rangle = |\downarrow_{f/g}\rangle$ , i.e.,  $|v\rangle = |u_{f/g}^k\rangle$ . Supondo, sem perda de generalidade, que os sítios pertencentes ao subsistema A são indexados por  $f(m)$  para algum valor de  $m$  no produtório restrito das contribuições não nulas, temos

$$\langle \Psi_k | \overline{\prod}_m Tr_{B\rho_{f(m),g(m)}} = \overline{\prod}_m \otimes \frac{1}{2} \langle u_{f(m)}^k |,$$

o que implica

$$\langle \Psi_k | \overline{\prod}_m Tr_{B\rho_{f(m),g(m)}} \log [Tr_{B\rho_{f(j),g(j)}}] | \Psi_k \rangle = \overline{\prod}_m \otimes \frac{1}{2} \langle u_{f(m)}^k | \prod_{l \neq f}^{\dim(A)} \otimes |u_l^k\rangle \otimes \log \left[ \frac{1}{2} |v\rangle \right].$$

<sup>11</sup>Aqui também, “k” é utilizado como índice.

<sup>12</sup>Esta notação será sistematicamente utilizada ao longo do texto, com variações explicitadas quando necessário, sempre adaptadas à conveniência da situação.



Por hipótese de  $f(m) \in A$ , segue que  $|v\rangle = |u_f^k\rangle$ , e portanto

$$\overline{\prod}_m \otimes \frac{1}{2} \langle u_{f(m)}^k | \prod_{l \neq f}^{dim(A)} \otimes |u_l^k\rangle \otimes \log \left[ \frac{1}{2} |v\rangle \right] = -\frac{1}{2} \log(2).$$

Somando sobre todos os cruzamentos e lembrando que temos dois graus de liberdade para o spin [ $|v\rangle = |\uparrow\rangle$  ou  $|v\rangle = |\downarrow\rangle$ ] obtemos simplesmente

$$S = N \log(2),$$

em que  $N$  é o número de cruzamentos devido aos singletos formados por *spins* que se encontram em subsistemas distintos, conforme ilustrado na Fig. 2.

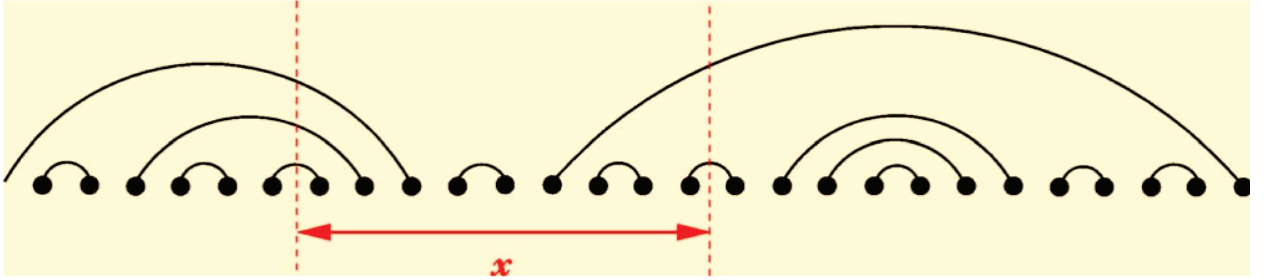


Figura 2: Representação pictórica de um sistema bipartido em que há acoplamentos entre sítios do subsistema  $A$  (de tamanho  $x$ ) e sítios do subsistema  $B$ . Nesse caso, temos um estado  $|\psi_{AB}\rangle \neq |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ , i.e., emaranhado. Figura retirada da Ref. [13].

A partir desse resultado, utiliza-se uma subrotina que gera configurações<sup>13</sup> da cadeia dXXZ e armazene os cruzamentos entre partição A e a partição B do sistema bipartido. Seremos capazes de encontrar a carga central efetiva através de cálculo das médias sobre várias realizações da cadeia dXXZ, conforme veremos no capítulo 4.

<sup>13</sup>Estas configurações são dadas pelo SDRG.

### 3 Cadeia dXX - tratamento exato

Tomando  $\Delta = 0$ , é possível obter de maneira exata as informações de interesse para o modelo descrito pela Eq. (1). Isto se deve ao fato de que a cadeia XX pode ser mapeada em uma cadeia de férmions livres, via a transformação de Jordan-Wigner [19, 20]. Comparações às previsões do SDRG serão conduzidas no capítulo seguinte. Os resultados, como já dissemos, também servem de motivação inicial para emprego da metodologia no estudo da cadeia dXXZ.

#### 3.1 Diagonalização

Mostraremos inicialmente que é possível mapear a cadeia dXX em uma cadeia de férmions livres com termos de *hopping* proporcionais aos acoplamentos  $K_j$  entre sítios. Números aleatórios foram gerados por meio da função *uniform(a,b)*, obtida por uso da biblioteca *random* em linguagem Python. Utilizamos a função *linalg.eigh* da biblioteca *scipy*, também na linguagem Python, para diagonalização de matrizes. Uma vez utilizada a distribuição uniforme (distribuição tipo “caixa”) no sorteio dos termos de acoplamento, podemos alterar a desordem introduzindo um parâmetro  $\alpha$ , tal que uma vez sorteado o  $i$ -ésimo coeficiente, aplica-se  $K_i^{1/\alpha}$ , de modo que os limites  $\alpha \rightarrow 0^+$  e  $\alpha \rightarrow \infty$  correspondam a desordem infinita e nula, respectivamente. Esse procedimento resulta em uma distribuição do tipo  $P(K) = \alpha K^{(\alpha-1)}$ .

##### 3.1.1 Fermionização

Definimos os operadores fermiônicos  $c_m$  e  $c_m^\dagger$  como: [veja a Ref [20]]

$$c_m = \exp(i\pi \sum_{k=1}^{m-1} \sigma_k^+ \sigma_k^-) \sigma_m^-, \quad (22)$$

$$c_m^\dagger = \exp(-i\pi \sum_{k=1}^{m-1} \sigma_k^+ \sigma_k^-) \sigma_m^+, \quad (23)$$

$$m = \{1, 2, \dots, L\}.$$

Devido ao fato que os operadores  $\hat{A} = i\pi \sum_{k=1}^{m-1} \sigma_k^+ \sigma_k^-$  e  $\hat{A}^\dagger = -i\pi \sum_{k=1}^{m-1} \sigma_k^+ \sigma_k^-$  são tais

que  $[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 0$ , é possível escrever

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{A}^\dagger} = e^{(\hat{A} + \hat{A}^\dagger)} = 1.$$

A partir deste fato e de que  $[\hat{A}, \sigma_m^-] = [\hat{A}^\dagger, \sigma_m^+] = 0$ , obtém-se

$$c_m^\dagger c_m = \sigma_m^+ \sigma_m^-.$$

Utilizando a definição dos operadores levantamento e abaixamento, acrescido às regras A12 e A13 do Apêndice A, podemos mostrar facilmente que os operadores definidos pelas Eq. (22) e Eq. (23) satisfazem as seguintes relações de anticomutação

$$\{c_j, c_{j'}\} = \{c_j^\dagger, c_{j'}^\dagger\} = 0, \quad (24)$$

e

$$\{c_j^\dagger, c_{j'}\} = \delta_{j,j'}. \quad (25)$$

Temos assim, explicitamente, a característica fermiônica dos operadores. Mostraremos que podemos expressar a cadeia  $dXX$  quadraticamente em termos destes operadores. Para tanto, note que podemos escrever os operadores de levantamento e abaixamento como

$$\sigma_j^- = \exp(-i\pi \sum_{k=1}^{j-1} \sigma_k^+ \sigma_k^-) c_j, \quad (26)$$

$$\sigma_{j'}^+ = \exp(i\pi \sum_{k=1}^{j'-1} \sigma_k^+ \sigma_k^-) c_{j'}^\dagger. \quad (27)$$

Desde modo, é fácil verificar que

$$\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- = c_j^\dagger \exp(-i\pi \sigma_j^+ \sigma_j^-) c_{j+1}. \quad (28)$$

Vamos mostrar abaixo que o lado direito da equação acima é  $c_j^\dagger c_{j+1}$ .

Note primeiramente que

$$\exp(i\pi \sigma_j^+ \sigma_j^-) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\pi)^n (\sigma_j^+ \sigma_j^-)^n}{n!},$$

entretanto, utilizando a relação A14 apresentada no Apêndice A, temos o seguinte

$$(\sigma_j^+ \sigma_j^-)^n = I \sigma_j^+ \sigma_j^-, n \in \mathbb{N},$$

sendo  $I$  a matriz identidade de ordem  $2^L$ , podemos escrever que

$$\begin{aligned} \exp(i\pi \sigma_j^+ \sigma_j^-) &= \sigma_j^+ \sigma_j^- \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\pi)^n}{n!} - I \right) + I, \\ &= \sigma_j^+ \sigma_j^- (e^{i\pi} - 1) + I. \end{aligned}$$

Logo

$$\exp(i\pi \sigma_j^+ \sigma_j^-) = I(1 - 2\sigma_j^+ \sigma_j^-) = (-\sigma_j^z),$$

e

$$\exp(i\pi \sigma_j^+ \sigma_j^-) = \exp(i\pi c_j^\dagger c_j) = I(1 - 2c_j^\dagger c_j).$$

Deste modo vemos que

$$\begin{aligned} \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- &= c_j^\dagger I(1 - 2c_j^\dagger c_j)c_{j+1} \\ &= c_j^\dagger c_{j+1} - 2(c_j^\dagger)^2 c_j c_{j+1} = c_j^\dagger c_{j+1}. \end{aligned} \quad (29)$$

Assim

$$\hat{H}_{dXX} = \sum_{j=1}^{L-1} \frac{K_j}{2} (c_j^\dagger c_{j+1} + h.c.) + \hat{H}_S(\phi). \quad (30)$$

De forma semelhante, o termo de superfície pode ser escrito

$$\hat{H}_S = \frac{K_L}{2} [(\sigma_L^+ \sigma_1^- + \sigma_1^+ \sigma_L^-) \cos\phi + i(\sigma_L^+ \sigma_1^- - \sigma_1^+ \sigma_L^-) \sin\phi] = (-1)^{n_\uparrow+1} \frac{K_L}{2} (c_L^\dagger c_1 e^{i\phi} + c_1^\dagger c_L e^{-i\phi}), \quad (31)$$

sendo  $n_\uparrow$  o número de partículas com *spin-up* na cadeia.

Assim, a cadeia dXX expressa em termos de operadores fermiônicos fica

$$\hat{H}_F = \sum_{j=1}^{L-1} \frac{K_j}{2} (c_j^\dagger c_{j+1} + h.c.) + \frac{K_L}{2} (-1)^{n_\uparrow+1} (c_L^\dagger c_1 e^{i\phi} + h.c.). \quad (32)$$

Note que se  $\phi = 0$  e se  $n_\uparrow$  for ímpar (par) a hamiltoniana acima está sob condições periódicas (antiperiódicas) de contorno. Podemos escrever  $(-1)^{n_\uparrow+1} = e^{i\alpha}$  sendo

$$\alpha = \begin{cases} 0, & n_\uparrow \text{ ímpar} \\ \pi, & n_\uparrow \text{ par} \end{cases}.$$

Notamos que a hamiltoniana apresenta simetria de calibre para a seguinte transformação

$$c_j \mapsto e^{i(\alpha j + \phi)/L} c_j,$$

sendo  $\alpha$  um número real qualquer<sup>14</sup>. Fazendo-se esta transformação obtemos que a hamiltoniana, em cadeias fechadas, fica da forma

$$\hat{H}_F = \sum_{j=1}^L \frac{K_j}{2} \left( e^{i(\alpha + \phi)/L} c_j^\dagger c_{j+1} + h.c. \right), \quad (33)$$

que consiste em uma hamiltoniana de férmions livres, sem spin, com termos de *hopping* complexos e aleatórios. Na presença de uma cadeia aberta e  $\phi = 0$ , temos simplesmente

$$\hat{H}_F = \sum_{j=1}^{L-1} \frac{K_j}{2} (c_j^\dagger c_{j+1} + h.c.). \quad (34)$$

Note que a hamiltoniana é real, independentemente das condições de contorno (C.C.), desde que tomemos  $\phi = 0$ . Nessa configuração, portanto, há possibilidade de construir autofunções reais ou imaginárias puras.

### 3.1.2 Obtenção do espectro

Partimos aqui da Eq. (33) com  $\phi = 0$ , isto é

$$\hat{H}_F = \sum_{j=1}^{L-1} \frac{K_j}{2} (c_j^\dagger c_{j+1} + h.c.) + \frac{K_L}{2} (e^{i\alpha} c_L^\dagger c_1 + h.c.).$$

Objetivando a diagonalização numérica do problema, observamos que é possível escre-

<sup>14</sup>É fácil ver que a transformação de calibre respeita a álgebra dos operadores  $c_j$ 's.

ver as Hamiltonianas dos casos tratados na forma

$$H = C^\dagger \Lambda C, \quad (35)$$

em que definimos:

$$C \equiv \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{L-1} \\ c_L \end{pmatrix} \quad (36)$$

e, tomando as devidas distinções nos casos OBC e PBC,

$$\Lambda(\gamma) \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & K_1 & 0 & \cdots & 0 & \gamma \\ K_1 & 0 & K_2 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & K_2 & 0 & K_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & K_3 & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & 0 & K_{L-1} \\ \gamma & 0 & 0 & \cdots & K_{L-1} & 0 \end{pmatrix} \quad (37)$$

$$\gamma = \begin{cases} 0, & \text{OBC} \\ (-1)^{n_\uparrow+1} K_L, & \text{contornos fechados} \end{cases}. \quad (38)$$

Por construção a matriz  $\Lambda$  é real e simétrica, portanto diagonalizável [9]. Buscamos uma transformação unitária  $A$  tal que  $D = A^\dagger \Lambda A$ , sendo  $D$  uma matriz diagonal, única a menos de ordenamento de colunas e linhas. No caso em cena,  $A^{15}$  é a matriz cujas colunas são os autovetores de  $\Lambda$ .

Note que em vista de  $A^\dagger A = AA^\dagger = I$ , têm-se

$$H = C^\dagger AA^\dagger \Lambda AA^\dagger C = X^\dagger D X, \quad (39)$$

---

<sup>15</sup>Denotamos os elementos de  $A$  por  $a_{ij}$

sendo

$$X \equiv \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{L-1} \\ x_L \end{pmatrix} = A^\dagger C. \quad (40)$$

Na forma diagonal, a hamiltoniana tem expressão genérica

$$H = \sum_{k=1}^L \Gamma_k x_k^\dagger x_k = \sum_{k=1}^L \Gamma_k n_k,$$

e estamos definindo aqui  $n_k = x_k^\dagger x_k$ .

Pela unitariedade da transformação segue

$$\sum_{\beta} a_{\alpha\beta} a_{\gamma\beta}^* = \delta_{\alpha\gamma}. \quad (41)$$

Uma consequência importante do fato acima é a invariância algébrica. Partindo da Eq. (40), temos

$$\begin{aligned} x_\alpha &= \sum_{\gamma=1}^L a_{\alpha\gamma}^* c_\gamma \rightarrow x_\alpha^\dagger = \sum_{\gamma=1}^L a_{\alpha\gamma} c_\gamma^\dagger, \\ \therefore \{x_\alpha, x_\beta\} &= \sum_{\gamma} \sum_{\lambda} a_{\beta\lambda}^* a_{\alpha\gamma}^* \{c_\gamma, c_\lambda\} = 0, \end{aligned} \quad (42)$$

e

$$\{x_\alpha^\dagger, x_\beta\} = \sum_{\gamma} \sum_{\lambda} a_{\beta\lambda} a_{\alpha\gamma}^* \{c_\gamma^\dagger, c_\lambda\} = \sum_{\gamma} \sum_{\lambda} a_{\alpha\gamma}^* a_{\beta\lambda} \delta_{\gamma\lambda} = \sum_{\lambda} a_{\alpha\gamma}^* a_{\beta\gamma} = \delta_{\alpha\beta}. \quad (43)$$

Por meio dessas relações de comutação, verifiquemos que  $\prod_{\nu \leq \lambda} x_\nu^\dagger |0\rangle$  é autoestado da hamiltoniana de nosso interesse, com autovalor  $E_\lambda = \sum_{\nu=1}^{\lambda} \Gamma_\nu$ . Da mesma forma, veremos que  $x_\alpha^\dagger \prod_{\nu \leq \lambda} x_\nu^\dagger |0\rangle$  também é autoestado e seu autovalor  $E_\alpha = \Gamma_\alpha + E_\lambda = \sum_{\nu=1}^{\alpha} \Gamma_\nu$ .

Temos que

$$\begin{aligned} H |0\rangle &= 0, \\ H x_\nu^\dagger |0\rangle &= \sum_{k=1}^L \Gamma_k n_k x_\nu^\dagger |0\rangle. \end{aligned}$$

Mas para todo  $k$  na soma, tem-se

$$x_k |0\rangle = 0,$$

e utilizando a Eq. (43) é fácil ver que

$$n_k x_\nu^\dagger = x_k^\dagger \delta^{k\nu} + (1 - \delta^{k\nu}) x_\nu^\dagger x_k^\dagger x_k.$$

Assim

$$n_k x_\nu^\dagger |0\rangle = \begin{cases} 0, & k \neq \nu \\ x_\nu^\dagger |0\rangle, & k = \nu \end{cases}.$$

Então,

$$H x_\nu^\dagger |0\rangle = \Gamma_\nu x_\nu^\dagger |0\rangle.$$

Por indução, segue

$$H x_\alpha^\dagger \prod_{\nu \leq \lambda} x_\nu^\dagger |0\rangle = \sum_{\nu=1}^{\alpha} \Gamma_\nu x_\alpha^\dagger \prod_{\nu \leq \lambda} x_\nu^\dagger |0\rangle.$$

Já que, mediante procedimento acima descrito, é possível gerar  $L$  autoestados ortogonais, segue que construímos todos autoestados possíveis na base de escolha, a menos é óbvio de representações equivalentes [21]. Pode-se garantir ortogonalidade dos autoestados, dado que  $\Lambda = \Lambda^\dagger$ .

Estamos interessados em determinar as propriedades das hamiltonianas a temperatura nula ( $T = 0$ ). A energia do estado fundamental será dada por  $\overline{\sum}_\nu \Gamma_\nu = E_{G.S.}$ , sendo a soma restrita aos valores de  $\nu$  tais que  $\Gamma_\nu \leq 0$ .

Com as informações expostas acima, somos capazes de determinar as funções correlação de interesse e calcular a EE, numericamente, para sistemas de tamanho  $L \sim 100$ .

### 3.2 Correlações

Utilizando a relação  $c^\dagger c = \sigma^+ \sigma^- = \frac{1}{2} + S^z$  e o Teorema de Wick [21], podemos escrever a Eq. (3) como

$$C_{n,l}(t) = \langle \Psi | c_n^\dagger(t) c_n(t) | \Psi \rangle \langle \Psi | c_l^\dagger(0) c_l(0) | \Psi \rangle + \langle \Psi | c_n^\dagger(t) c_l(0) | \Psi \rangle \langle \Psi | c_n(t) c_l^\dagger(0) | \Psi \rangle + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} - \Theta(t) \right),$$

sendo  $\Theta(t) = \langle \Psi | c_n^\dagger(t) c_n(t) | \Psi \rangle + \langle \Psi | c_l^\dagger(0) c_l(0) | \Psi \rangle$ .

Uma vez que  $\langle \Psi | c_n^\dagger(t) c_n(t) | \Psi \rangle = \langle \Psi | e^{iHt} c_n^\dagger(0) c_n(0) e^{-iHt} | \Psi \rangle$ , é fácil notar a invariância temporal dessa grandeza, seja por observar o resultado  $\frac{d}{dt} \langle \Psi | c_n^\dagger(t) c_n(t) | \Psi \rangle = i \langle \Psi | [H, e^{iHt} c_n^\dagger(0) c_n(0) e^{-iHt}] | \Psi \rangle = 0$ , seja por utilizar que  $e^{-iHt} | \Psi \rangle = e^{-iE_{G.S.}t} | \Psi \rangle$ . Logo  $\langle \Psi | c_n^\dagger(t) c_n(t) | \Psi \rangle = \langle \Psi | c_n^\dagger(0) c_n(0) | \Psi \rangle$ , do quê compreendemos nossas tarefas resumirem



a calcular as seguintes grandezas:

$$\alpha_j = \langle \Psi | c_j^\dagger(0) c_j(0) | \Psi \rangle, \quad (44)$$

$$\beta_{n,l}(t) = \langle \Psi | c_n^\dagger(t) c_l(0) | \Psi \rangle, \quad (45)$$

$$\gamma_{n,l}(t) = \langle \Psi | c_n(t) c_l^\dagger(0) | \Psi \rangle. \quad (46)$$

Iniciaremos pela grandeza  $\alpha_j$ . De acordo com a Eq. (40), por definição

$$x_k^\dagger = \sum_j a_{kj} c_j^\dagger \longrightarrow c_m^\dagger = \sum_b a_{mb}^* x_b^\dagger, \quad (47)$$

$$c_j = \sum_\tau a_{j\tau} x_\tau.$$

$$\therefore \alpha_j = \sum_{b,\tau} a_{j\tau} a_{jb}^* \langle \Psi | x_b^\dagger x_\tau | \Psi \rangle. \quad (48)$$

Nas somatórias acima, apenas caso  $b = \tau$  esses termos podem contribuir, devido à ortogonalidade dos estados. Ademais, se  $H x_\tau^\dagger |0\rangle = \Gamma_\tau |0\rangle$  em que  $\Gamma_\tau > 0$ , devido à Eq. (43) segue  $x_\tau | \Psi \rangle = 0$ . Logo,

$$\alpha_j = \overline{\sum_{\tau|\Gamma_\tau \leq 0} a_{j\tau} a_{j\tau}^*}, \quad (49)$$

sendo explicitada a restrição dos valores de  $\tau$ , quais sejam, aqueles em que  $\Gamma_\tau \leq 0$ .

Para lidar com as grandezas  $\beta_{n,l}$  e  $\gamma_{n,l}$  encontraremos expressão conveniente para  $x_k^\dagger(t)$ . Primeiro, escrevemos

$$e^{iHt} = e^{it \sum_k \Gamma_k n_k}.$$

Já que  $[n_k, n_l] = 0$ ,

$$e^{it \sum_k \Gamma_k n_k} = \prod_k e^{it \Gamma_k n_k}. \quad (50)$$

Temos ainda

$$n_k^2 = n_k(1 - x_k x_k^\dagger) = n_k,$$

de que facilmente decorre

$$n_k^m = n_k \quad \forall m \in \mathbb{N}. \quad (51)$$

Vamos definir um operador auxiliar. Primeiro, note que

$$e^{it\Gamma_k n_k} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(it\Gamma_k n_k)^j}{j!} = I + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(it\Gamma_k n_k)^j}{j!}.$$

Pela Eq. (51), podemos escrever

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{(it\Gamma_k n_k)^j}{j!} = n_k \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(it\Gamma_k)^j}{j!},$$

e por sua vez

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{(it\Gamma_k)^j}{j!} = e^{it\Gamma_k} - 1.$$

$$\therefore e^{it\Gamma_k n_k} = I + n_k(e^{it\Gamma_k} - 1) = \Lambda_k, \quad (52)$$

$$\therefore e^{itH} = \prod_k \Lambda_k. \quad (53)$$

Perceba que  $[n_k, n_l]$  implica  $[\Lambda_k, \Lambda_l] = 0$ . Temos, por meio da Eq. (52):

$$\Lambda_k x_l^\dagger = \delta_k^l e^{it\Gamma_k} x_k^\dagger + (1 - \delta_k^l) x_k^\dagger \Lambda_l. \quad (54)$$

Por construção

$$x_k^\dagger(t) = e^{iHt} x_k^\dagger(0) e^{-iHt}$$

$$\therefore x_k^\dagger(t) = \prod_k \Lambda_k x_k^\dagger \prod_\theta \Lambda_\theta^\dagger.$$

Usando a Eq. (54) na equação acima, segue o resultado

$$x_k^\dagger(t) = e^{it\Gamma_k} x_k^\dagger. \quad (55)$$

Mas

$$c_n^\dagger(t) = \sum_b a_{nb}^* e^{it\Gamma_b} x_b^\dagger,$$

portanto,

$$\beta_{n,l}(t) = \sum_{b,\chi} a_{nb}^* a_{l\chi} e^{it\Gamma_b} \langle \Psi | x_b^\dagger x_\chi | \Psi \rangle.$$

Por argumentações idênticas às que nos conduziram da Eq. (48) à Eq. (49), obtemos que

$$\beta_{n,l}(t) = \overline{\sum_{\chi|\Gamma_\chi \leq 0} a_{n\chi}^* a_{l\chi} e^{it\Gamma_\chi}}. \quad (56)$$

Quanto a  $\gamma_{n,l}(t)$ , escrevemos

$$\gamma_{n,l}(t) = \sum_{k,m} a_{nm}^* a_{lk} e^{-it\Gamma_k} \langle \Psi | x_k x_m^\dagger | \Psi \rangle.$$

Uma vez que se trata de sistema fermiônico, caso  $m$  ou  $k$  correspondam a níveis já ocupados, pela Eq. (42) o valor esperado será nulo. Novamente, por ortogonalidade,  $m \neq k$  também corresponde a uma contribuição nula. Valores não nulos, portanto, corresponderão às contribuições de  $m = k$  tais que  $\Gamma_k > 0$ .

$$\therefore \gamma_{n,l}(t) = \overline{\sum_{k|\Gamma_k > 0} a_{nk}^* a_{lk} e^{-it\Gamma_k}}, \quad (57)$$

com a soma restrita em conformidade ao que expomos no parágrafo anterior.

Finalmente, juntando tudo:

$$C_{n,l}(t) = \overline{\sum_{\tau|\Gamma_\tau \leq 0} \sum_{u|\Gamma_u \leq 0} a_{n\tau} a_{n\tau}^* a_{lu} a_{lu}^*} + \overline{\sum_{u|\Gamma_u \leq 0} \sum_{k|\Gamma_k > 0} a_{n\chi}^* a_{nk}^* a_{l\chi} a_{lk} e^{it(\Gamma_\chi - \Gamma_k)}} + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} - \Theta(t) \right), \quad (58)$$

sendo  $\Theta(t) = \Theta(0) = \Theta = \overline{\sum_{\tau|\Gamma_\tau \leq 0} (a_{n\tau} a_{n\tau}^* + a_{l\tau} a_{l\tau}^*)}$ , e como antes os valores  $a_{\alpha\beta}$  são entradas da matriz de autovetores que diagonaliza a hamiltoniana. Note que as condições de contorno inicialmente impostas estão embutidas nos valores dos  $\Gamma_k$ 's e dos coeficientes  $a_{ij}$ 's.

### 3.3 Entropia de Emaranhamento - o método da matriz correlação

Para a cadeia dXX existe um procedimento exato que permite obter numericamente sua entropia de emaranhamento em um bloco de  $l$  spins. Conforme veremos, é possível de-

terminar a EE conhecendo os autovalores da matriz correlação  $A$  (seguimos integralmente a Ref. [22] nessa discussão), cujos elementos são definidos como

$$A_{mn} = \langle \Psi | c_m^\dagger c_n | \Psi \rangle, \quad (59)$$

sendo  $0 < m, n \leq l$ . Por construção  $A_{mn} = A_{nm}^*$ , i.e., a matriz correlação é hermitiana. Considere que o sistema bipartido de  $L$  sítios seja composto do subsistema  $A$  de tamanho  $l$  e do subsistema  $B$  de tamanho  $L-l$ . Seja  $\rho_A(l)$  a matriz densidade reduzida do subsistema  $A$ , então a matriz de correlação pode ser computada [22] pela relação

$$A_{mn} = Tr \left( c_m^\dagger c_n \rho_A \right). \quad (60)$$

Já que o objetivo é encontrar a EE, devemos obter  $\rho_A$ . Para tanto, utilizaremos a hermiticidade de  $A_{mn}$  para diagonalizá-la via uma transformação unitária  $u_{ij}$ , em busca de relacionar os autovalores de  $\rho_A$  com dos autovalores da matriz correlação  $A$ . Definindo  $g_p^\dagger = \sum_n c_n^\dagger u_{nq}^*$  e o escalar  $\langle g_p^\dagger g_p \rangle = \nu_p$ , temos

$$G_{pq} = \sum_{m,n=0} u_{pm} A_{mn} u_{nq}^* = \langle g_p^\dagger g_p \rangle \delta_{pq} = \nu_p \delta_{pq}. \quad (61)$$

Novamente, a matriz densidade do bloco governa os valores esperados, fornecendo

$$G_{pq} = Tr \left( g_p^\dagger g_q \rho_A \right) = \nu_p \delta_{pq}. \quad (62)$$

Vamos tentar uma solução em que o operador densidade é separável no sentido que

$$\rho_A = \varrho_1 \otimes \cdots \otimes \varrho_l, \quad (63)$$

sendo  $\varrho_j$  a matriz densidade correspondendo ao  $j$ -ésimo modo fermiônico excitado por  $g_j^\dagger$ .

Em representação matricial, temos

$$g_j = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad g_j^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (64)$$

e

$$\varrho_j = \begin{pmatrix} \alpha_j & \beta_j \\ \beta_j^* & 1 - \alpha_j \end{pmatrix}, \quad (65)$$

sendo  $\alpha_j$  e  $\beta_j$  os elementos matriciais de  $\varrho_j$  que serão determinados. Uma vez que  $Tr(\varrho_m) = 1$ , escrevemos

$$\langle g_j \rangle = 0 = Tr(g_j \rho_A) = Tr\left(\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_j & \beta_j \\ \beta_j^* & 1 - \alpha_j \end{pmatrix}\right) = Tr\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \alpha_j & \beta_j \end{pmatrix} = \beta_j. \quad (66)$$

Ademais, pela Eq.(61)temos

$$Tr(g_j^\dagger g_j \rho_A) = Tr\left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_j & 0 \\ 0 & 1 - \alpha_j \end{pmatrix}\right) = \alpha_j = \nu_j. \quad (67)$$

Isto é, os coeficientes diagonais da matriz correlação e do operador densidade reduzido mantém uma correspondência.

Com o que foi apresentado, somos capazes de obter uma expressão fechada para a entropia de emaranhamento  $S = -Tr[\rho_A \log(\rho_A)]$ . Vamos mostrar que podemos escrever a EE da seguinte forma

$$S = \sum_{\nu} H(\nu), \quad (68)$$

com a definição da entropia binária:  $H(\nu) = -\nu \log(\nu) - (1 - \nu) \log(1 - \nu)$ , sendo  $\nu$  os autovalores da matriz correlação para o bloco de  $l$  spins.

Temos

$$\rho_A = \prod_{j=1}^l \otimes \varrho_j = \prod_{j=1}^l \otimes (\nu_j |0\rangle_j \langle 0|_j + (1 - \nu_j) |1\rangle_j \langle 1|_j), \quad (69)$$

sendo

$$|0\rangle_j = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (70)$$

os graus de liberdade do j-ésimo modo.

O logaritmo pode ser definido para um operador com espectro limitado pela unidade a partir da expansão análoga para um número real  $x$  tal que  $-1 \leq x < 1$ , qual seja:

$$\log(1 - x) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n}.$$

Denotando  $I$  o operador identidade no espaço de dimensão  $2^l$ , defina

$$I - \rho_A = \theta_A, \quad (71)$$

e então, como a norma dos autovalores de  $\varrho_m$  é tal que  $\max|\varrho_m| \leq 1 - \varepsilon$  para  $\varepsilon \rightarrow 0^+$ , é lícito escrever

$$\log \rho_A = \log(1 - \theta_A) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1 - \rho_A)^n}{n} = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (-\rho_A)^k, \quad (72)$$

aplicando a Eq. (69) na equação acima e utilizando a ortonormalidade dos estados definidos na Eq. (70), temos

$$\log \rho_A = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (-1)^k \prod_{j=1}^l \otimes (\nu_j^k |0\rangle_j \langle 0|_j + (1 - \nu_j)^k |1\rangle_j \langle 1|_j). \quad (73)$$

Ora, pela separabilidade do operador densidade temos

$$\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A) = \sum_{j=1}^l \langle 0|_j \rho_A \log \rho_A |0\rangle_j + \langle 1|_j \rho_A \log \rho_A |1\rangle_j, \quad (74)$$

ou seja, traçamos os graus de liberdade do  $j$ -ésimo modo e somamos, pois observe que  $\log \rho_A |0\rangle_j = \log \nu_j |0\rangle_j$  e  $\log \rho_A |1\rangle_j = \log(1 - \nu_j) |1\rangle_j$ . Disso resulta

$$\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A) = \sum_{j=1}^l \text{Tr}_j(\varrho_j \log \rho_A), \quad (75)$$

Mas, utilizando a Eq. (73) segue

$$\text{Tr}_j(\varrho_j \log \rho_A) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} (-1)^k (\nu_j^{k+1} + (1 - \nu_j)^{k+1}) = \nu_j \log \nu_j + (1 - \nu_j) \log(1 - \nu_j), \quad (76)$$

estabelecendo, portanto, a Eq. (68).

Desta forma, tendo em mãos uma subrotina que avalie os autovalores da matriz correlação, calcula-se exatamente a entropia de emaranhamento. O resultado devolve, como esperado, uma carga central efetiva  $c_{eff} \simeq \frac{\log 2}{6}$ , conforme veremos no capítulo seguinte.

Isto serve como critério mínimo de validação para o cálculo da entropia via SDRG, cujos resultados discutimos no próximo capítulo. Como anteriormente ressaltamos, os resultados nas Eqs. (58) e (68) servirão para confrontar o SDRG no caso  $\Delta = 0$ , assim como para motivar a busca por leis de potência nas correlações médias que definimos a seguir.

## 4 Resultados

Dedicamos este capítulo à exposição e comentário dos resultados obtidos, tanto aqueles calculados de maneira exata, quais sejam, os referentes à cadeia dXX, quanto em relação ao procedimento geral provido pelo *framework* do SDRG, como anteriormente discutido.

### 4.1 A cadeia dXX

Para a cadeia dXX, todos problemas abordados em nosso trabalho admitem solução numérica de forma exata, como apresentado no capítulo anterior. Esses resultados servirão de comparativo para com as informações levantadas para a cadeia dXXZ, através do SDRG em  $\Delta = 0$ , fornecendo assim certo critério de validação dos resultados previstos pelo SDRG.

#### 4.1.1 Correlações estáticas

Vamos focar agora nas correlações médias, em  $t = 0$

$$C_{n,l}^{med} \equiv \sum_{r=1}^N \frac{\langle \Psi | S_n^z S_l^z | \Psi \rangle_r}{N}, \quad (77)$$

ou seja: (i) prepare uma cadeia com sua estrutura de acoplamentos  $K_j$ 's, para uma dada desordem; (ii) calcule e guarde as correlações; (iii) repita N-1 vezes; (iv) calcule a média sobre  $N$  realizações.

É bem conhecido que no caso desordenado  $C_{n,l}^{med}$  decaia seguindo lei de potência com expoente  $p = 2$ , i.e.,  $C_{n,l}^{med} \sim \frac{1}{|n-l|^2}$ . Este resultado pode ser obtido analiticamente utilizando-se do SDRG [6]. De fato nossos resultados numéricos estão de acordo com o resultado analítico, bem como resultados numéricos obtidos anteriormente [23]. A nível ilustrativo apresentamos na Fig. 3  $\log(C_{l=100,n}^{med})$  para uma cadeia dXX de tamanho  $L = 200$  sob OBC. A Fig. 3(a) corresponde aos dados exatos [veja Eq. (58)] e na Fig. 3(b) são apresentados os dados obtidos pelo SDRG. Conforme vemos, o decaimento da correlação média é em lei de potência com expoente 2. Os dados numéricos foram interpolados utilizando o pacote *optimize* da biblioteca *scipy* em linguagem Python.



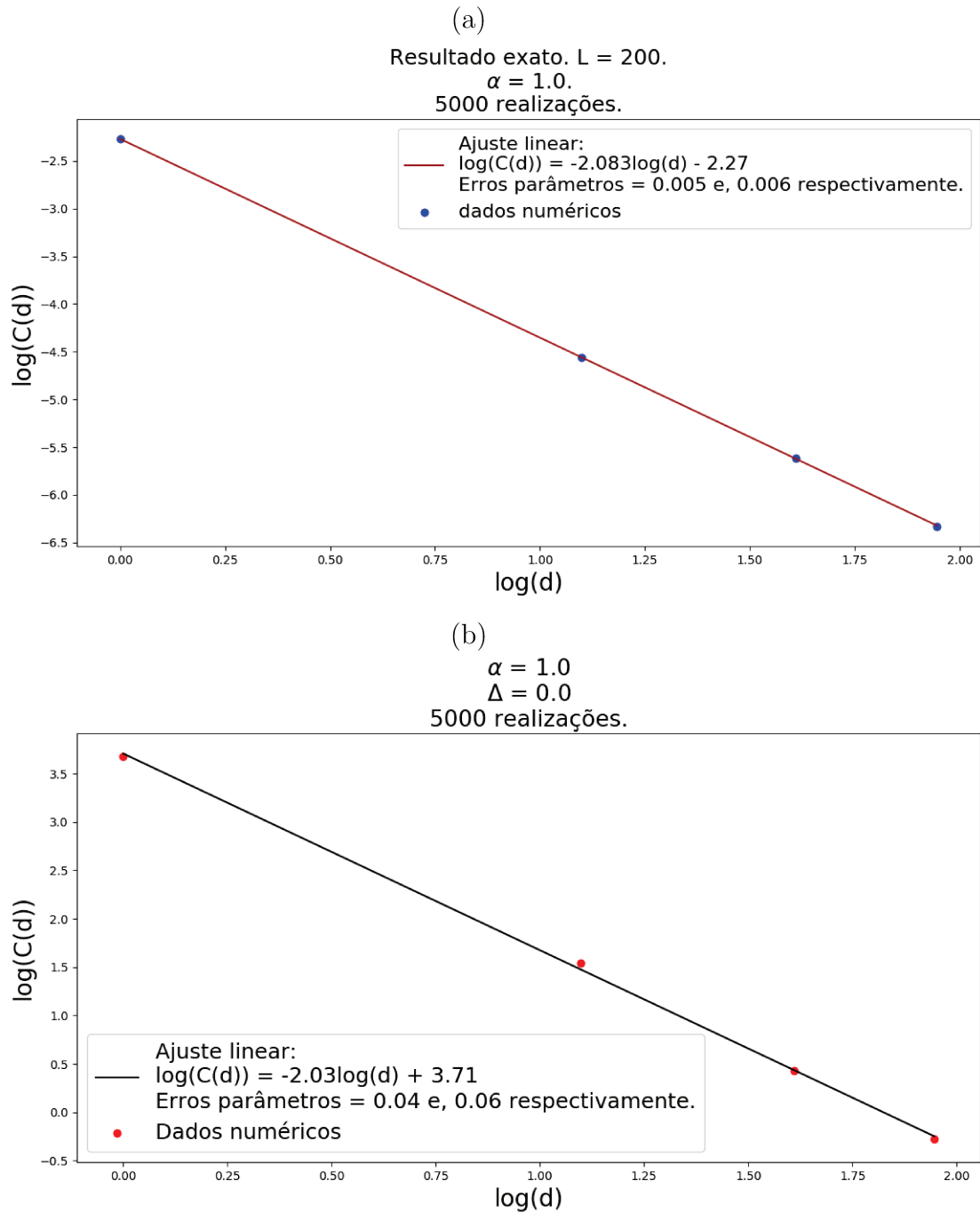


Figura 3:  $\log(C_{l=100,n}^{med})$  vs  $\log(d)$ , sendo  $d = n - l$  para a cadeia dXX de tamanho  $L = 200$ . Nós calculamos as médias sob 5000 realizações de desordem. O círculo corresponde ao valor numérico e a linha sólida é o resultado do fit. A curva superior consiste em informação obtida exatamente, através da Eq. (61); a curva abaixo desta discrimina o resultado obtido através do SDRG.

Ressaltamos que, apesar do exemplo acima se referir a uma desordem particular, representada por  $\alpha = 1,0$ , o resultado é universal e independe de  $\alpha$ . Isso motiva a pergunta para o caso em que  $\Delta \neq 0$ : na cadeia dXXZ, a média das correlações cai com lei de potência? Note que para este caso, a diagonalização exata é limitada a redes pequenas

( $L \sim 30$ ). Por esta razão, o SDRG se torna uma ferramenta importante na análise destes casos.

#### 4.1.2 Correlações dinâmicas

A fim de verificar a validade das correlações dinâmicas  $C_{j,k}^{SDRG}(t)$ , comparamos estas correlações com o resultado exato dado pela Eq. (58). Para melhor visualização das diferenças entre estas, calculamos a Transformada de Fourier das correlações. A Transformada de Fourier no tempo fornece o perfil de frequências de ressonância. Pela paridade das correlações  $C_{n,l}(t) = C_{n,l}(-t)$ , a Transformada é uma função real. Nas Fig. 4, 5 e 6 dispomos exemplos de curvas cujas principais nuances foram encontradas em várias realizações da cadeia dXX. Classificamos de alta energia aqueles dímeros, tais como fornecidos pelo SDRG, nos quais a diferença entre o estado fundamental e o primeiro excitado é maior [veja p. 5], com relação aos demais. Em geral, os primeiros dímeros formados no processo de decimação tem esse *gap* mais proeminente, enquanto que os últimos singletos formados terão, no limite termodinâmico, *gap* nulo. Razoavelmente portanto, espera-se que os singletos formados em passos intermediários apresentem um *gap* entre os extremos.

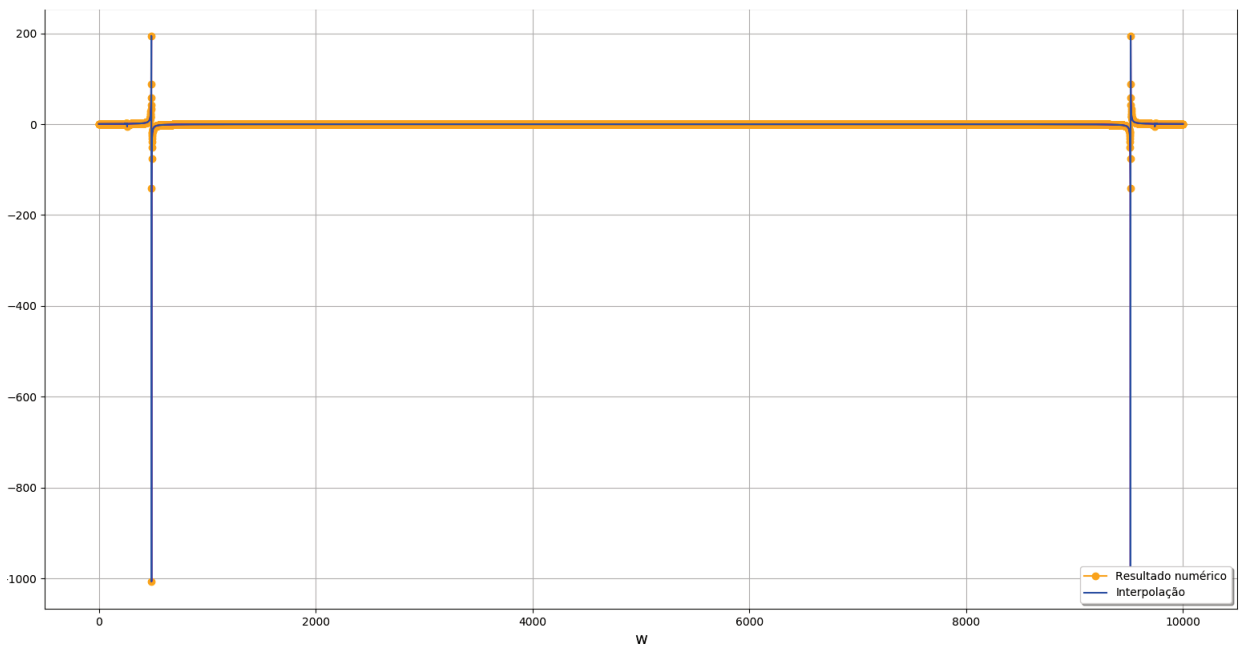


Figura 4: Parte real da Transformada de Fourier no tempo de uma correlação que detém perfil típico dos dímeros de mais alta energia, como função da frequência  $w$ . A realização-exemplo é de uma cadeia dXX de tamanho  $L = 200$ .

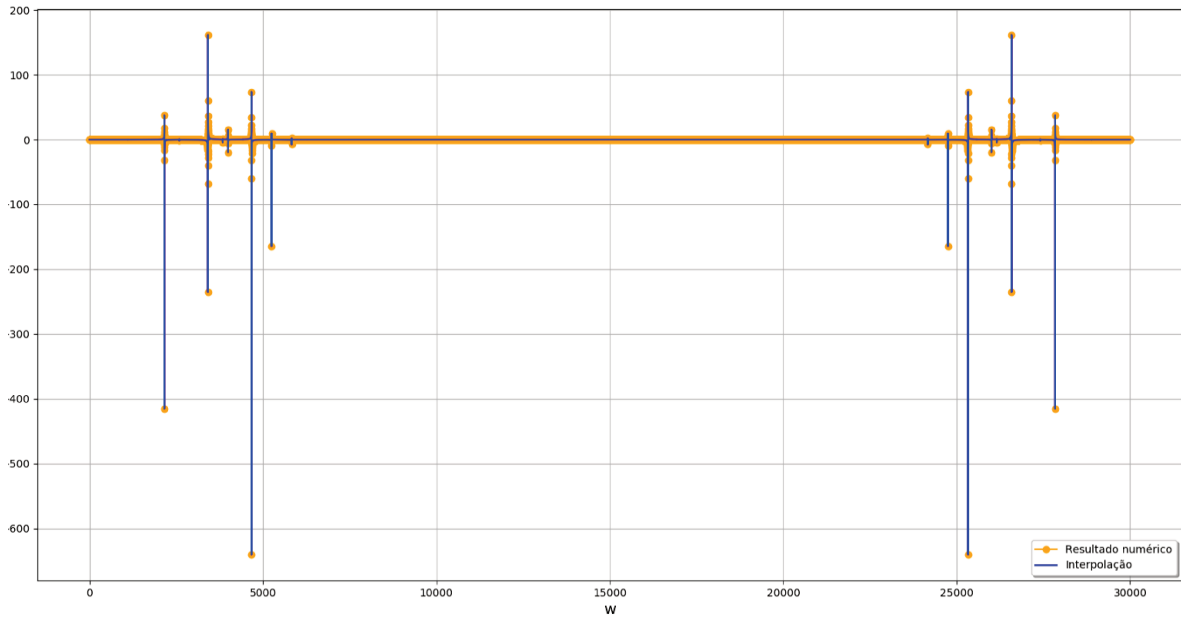


Figura 5: Parte real da Transformada de Fourier no tempo de uma correlação que detém perfil típico dos dímeros de energia intermediária, como função da frequência  $w$ . A realização-exemplo é de uma cadeia dXX de tamanho  $L = 200$ .

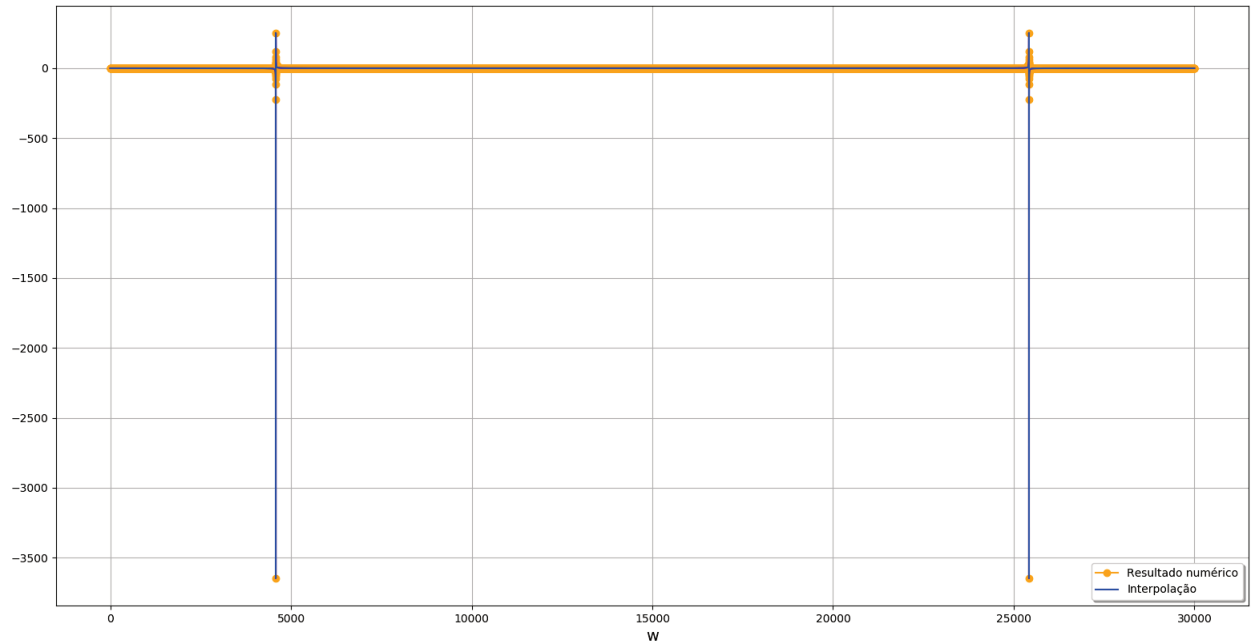


Figura 6: Parte real da Transformada de Fourier no tempo de uma correlação que detém perfil típico dos dímeros de mais baixa energia, como função da frequência  $w$ . A realização-exemplo é de uma cadeia dXX de tamanho  $L = 150$ .

Pudemos notar, em vários casos, a presença de um pico bem definido, conforme esperado de acordo com a teoria efetiva, o que é uma assinatura da clusterização de pares de singletos, i.e., da RSP [ver Eq. (19)]. O acoplamento efetivo é obtido por meio de

conversão apropriada a partir da frequência  $\omega$  na Transformada. Para esses casos, acordo numérico se mostrou pelo menos em 3 ou 4 ordens de grandeza. Noutros vários, temos a presença de picos bem menores [como apresentado na Figura 5]. Este resultado implica que o SDRG não é capaz de descrever bem algumas correlações temporais. É possível que estes picos sejam capturados mediante uma teoria de perturbação de mais alta ordem, ou mesmo corrigindo o estado fundamental efetivo. Já no contexto de várias frequências comparáveis o estudo deve ser conduzido mais cautelosamente, sendo possível ainda não haver tratamento computacionalmente conveniente, ou mesmo de todo, por uma teoria de perturbação. Observamos ainda que a energia do estado fundamental obtida via SDRG superestima o valor exato. Isso, acrescido ao fato de que a renormalização é exata apenas em limites termodinâmico e de desordem infinita, possibilita-nos inferir que uma decomposição talvez mais adequada para tratar sistemas finitos reais leve em consideração efeitos de três corpos (adição de três spin- $\frac{1}{2}$ , resultando em subespaços com spin  $1/2$  e  $3/2$ ). O estado fundamental desse sistema é obtido exatamente, com certa facilidade, e talvez seja um caminho viável para utilizar como teoria efetiva. Esse efeito pode ser importante particularmente nos casos em que a diferença entre o maior acoplamento e o segundo maior, em uma determinada etapa do algoritmo, não seja tão proeminente e suas distâncias suficientemente pequenas, podendo mesmo tais acoplamentos ser primeiros vizinhos.

A lição a ser aprendida aqui, nos parece ser que o estudo das propriedades **dinâmicas** da cadeia dXX é no mínimo delicado, quando conduzido através do SDRG: mesmo para  $\alpha = 0,4$  e  $L = 800$  ainda se pode apreciar desvios significativos da teoria efetiva, para várias correlações. Uma vez que se espera, para cadeias relativamente grandes, a necessidade de pouca desordem para que uma RSP apareça, pode ser que o algoritmo implementado sofra devido às limitações numéricas. Por outro lado, devido ao sucesso da explicação de propriedades estáticas - pois o acordo obtido foi relevante para assim o considerarmos, nas correlações estáticas e na EE, como será visto adiante - é forçoso inferir que o que se encontra por trás da dinâmica física desse sistema está, na verdade, subapreciado pelo SDRG convencional.

#### 4.1.3 A Entropia de Emaranhamento

A partir do já discutido método da matriz correlação, o cálculo exato pode ser feito para a entropia média de um sistema bipartido de tamanho  $L$ . Abaixo, segue o resultado e à frente a EE obtida a partir do estado fundamental efetivo, como fornecido pelo SDRG.

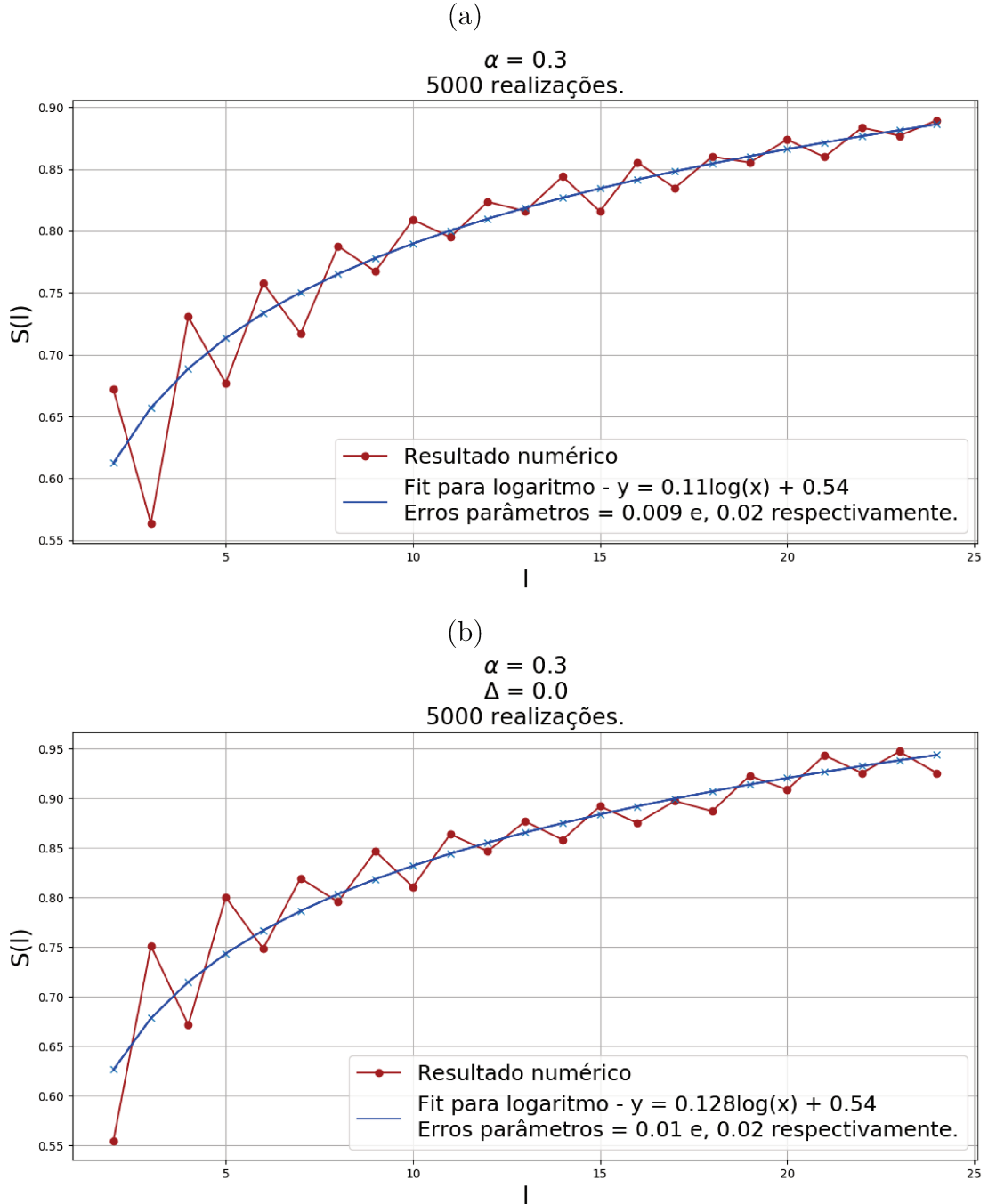


Figura 7: Valor médio da entropia de emaranhamento como função do tamanho do sub-sistema  $A$  para a cadeia dXX de tamanho  $L = 120$ . A média foi calculada sob 5000 realizações de desordem. (a) Resultado obtido via diagonalização exata (matriz correlação); (b) Resultados do SDRG.

Nossos resultados indicam que o pré-fator do termo logarítmico é  $c_{eff} \approx 0,1 \approx \frac{\log 2}{6}$ ,

em acordo com o resultado analítico [17].

## 4.2 A cadeia dXXZ

### 4.2.1 Correlações

Vamos calcular agora as funções correlação estática para uma cadeia dXXZ genérica, isto é,  $\alpha$  arbitrário e  $-0,5 < \Delta \leq 1$ . Determinaremos as correlações médias da seguinte forma: para uma dada realização  $r$ , calculamos todas as correlações  $\langle \sigma_k^z \sigma_j^z \rangle$  na parte central da cadeia, i. e.,  $L/4 < k, j < 3L/4$ . Estas correlações são obtidas depois que utilizamos o processo de decimação do grupo de renormalização descrito no capítulo 2. Uma vez encontradas estas correlações, determinamos a soma

$$C_r(d) = \overline{\sum_{j,k} \langle \sigma_k^z \sigma_j^z \rangle},$$

de correlações não-nulas entre sítios a uma distância  $d = |j - k|$  para a realização  $r$ . Finalmente, obtemos a correlação média para  $N$  realizações:  $C(d) = \frac{1}{N} \sum_{r=1}^N C_r(d)$ . Concentraremos nossos estudos em cadeias abertas (OBC).

Devido aos dados obtidos, somos naturalmente compelidos a inferir que para quaisquer valores  $0 \leq \alpha < \infty$  aliados a anisotropias  $\Delta$  na condição  $-0,5 < \Delta \leq 1$  as correlações médias seguem uma lei de potência do tipo  $C(d) \sim d^{-2}$ , característica de sistemas críticos [24]. Este comportamento foi encontrado sistematicamente por nós, tratando de sistemas com  $L \sim 10^2$ , para  $N \sim 10^3$  ou  $N \sim 10^4$  realizações.

Ilustrando o comportamento universal observado que mencionamos, as figuras 9 e 10 trazem médias sobre realizações das cadeias dXXX e dXXZ respectivamente. Ressaltamos que o resultado aproximado para a cadeia dXX é muito bem respaldado pela informação exata obtida numericamente através dos métodos dispostos na seção 3.2. Nisso, somado ao fato de que as leis de potência com decaimento quadrático são consistentemente recuperadas, com erros da ordem de  $L^{-1}$ , contemplamos a eficácia do SDRG para descrição das correlações de spin  $\langle \sigma_j^z \sigma_k^z \rangle$ . Ressaltamos que estes resultados são obtidos também através do *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG) modificado para tratar sistemas desordenados, conforme proposto em [25].

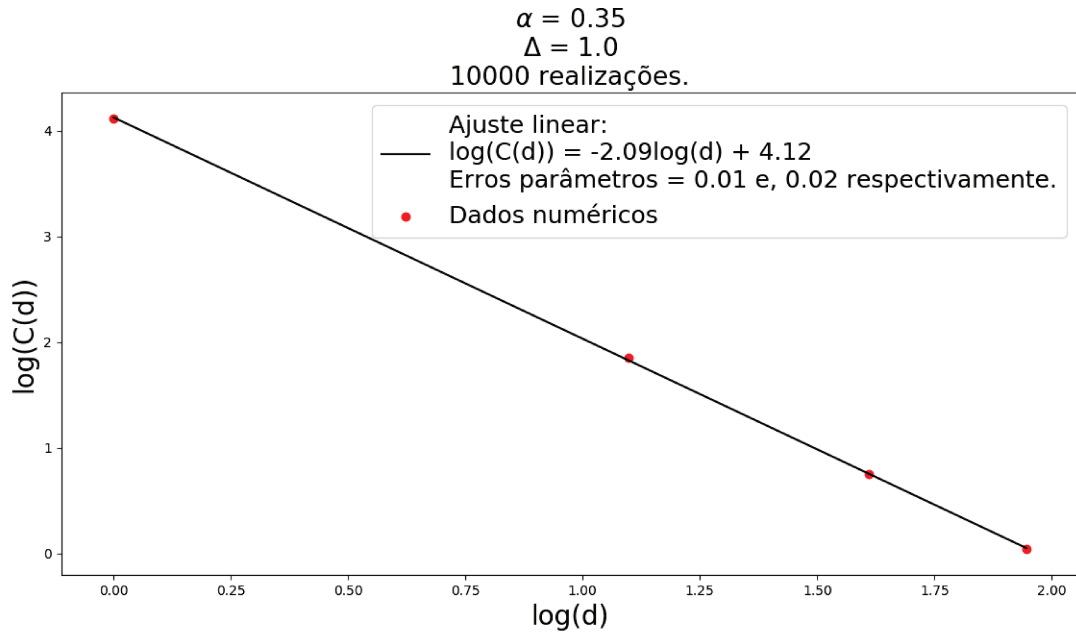


Figura 8:  $\log(C(d))$  vs  $\log(d)$  para a cadeia dXXX de tamanho  $L = 200$ . Calculamos as médias por meio do SDRG sob 10000 realizações. O círculo corresponde ao valor numérico e a linha sólida é a expressão obtida por ajuste.

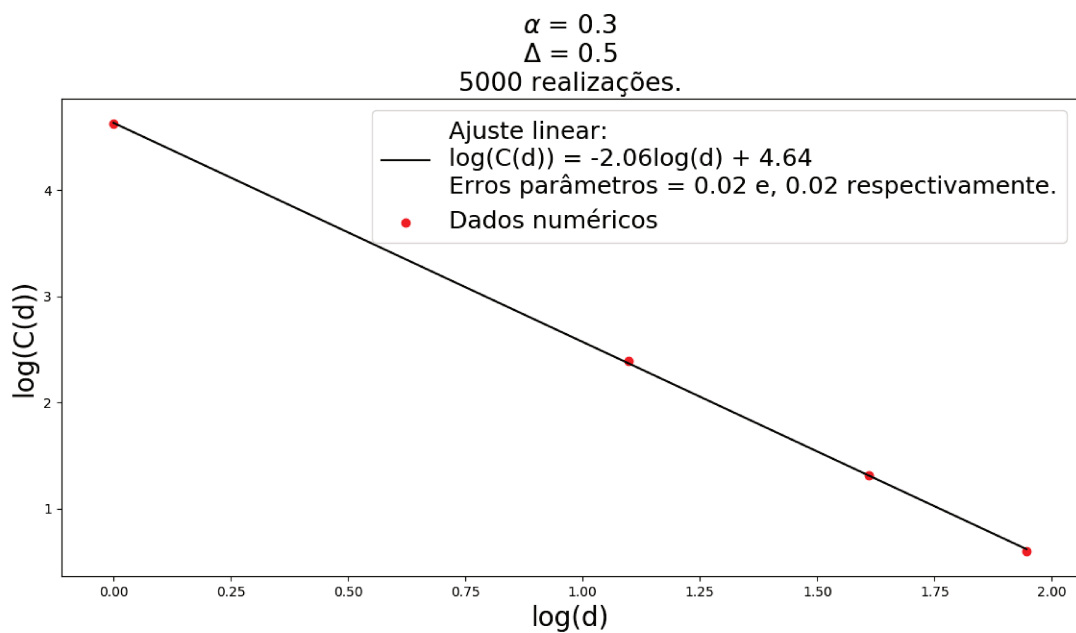


Figura 9:  $\log(C(d))$  vs  $\log(d)$  para a cadeia dXXZ de tamanho  $L = 500$ . Calculamos as médias por meio do SDRG sob 5000 realizações. O círculo corresponde ao valor numérico e a linha sólida é a expressão obtida por ajuste.

### 4.2.2 Entropia

Para calcular a entropia de emaranhamento, constrói-se uma subrotina que gera várias configurações da cadeia dXXZ e conta os cruzamentos para todas partições possíveis do sistema  $AB$  bipartido (veja seção 2.2), calculando assim a média sobre realizações. Com essa média, podemos inferir o valor do coeficiente do termo logarítmico. Observa-se aqui também, para os limites em que a RSP é verificada, uma dependência universal de escala. A fim de ilustrar o comportamento geral observado, acrescentando ao que já discutimos no caso  $\Delta = 0$ , discriminamos o resultado na Fig. 10 a seguir.

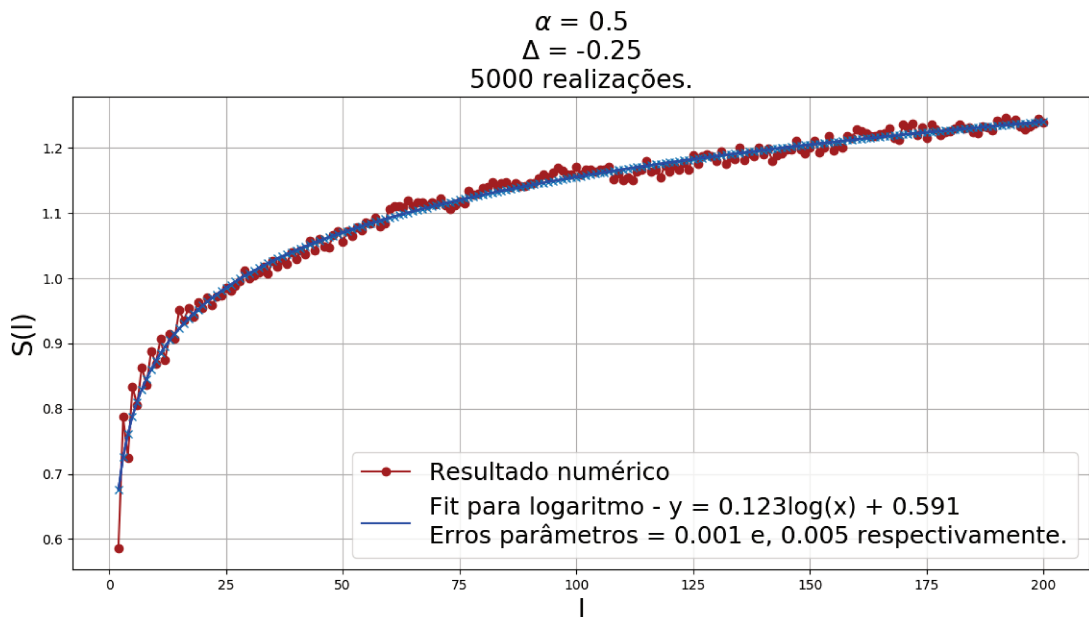


Figura 10: Valor médio da entropia de emaranhamento como função do tamanho do subsistema  $A$  para a cadeia dXXZ de tamanho  $L = 1000$ . A média foi calculada sob 5000 realizações de desordem. Resultado obtido via SDRG.

Ora, a carga central efetiva é

$$c_{eff} = a,$$

se  $a$  é o fator de escala nas curvas log acima. Isso implica que encontramos

$$c_{eff} \simeq \frac{\log 2}{6} \approx 0,12,$$

de forma razoavelmente consistente, explicitando a violação da lei entrópica de área bem como a universalidade da EE para as cadeias dXXZ na região de anisotropia  $-0,5 < \Delta \leq 1$ . Conforme já mencionado, estes resultados estão de acordo com o resultado analítico



obtido na Ref. [17].

## 5 Conclusões

Nesse trabalho, discutimos resultados exatos e aproximados para a cadeia dXXZ, ou seja, a cadeia XXZ desordenada; quanto aos parâmetros de desordem e de anisotropia, respectivamente  $\alpha$  e  $\Delta$ , concentramos na região  $0 \leq \alpha < \infty$  e  $-0,5 < \Delta \leq 1$  que, é sabido, tem sua física de baixas energias descrita por uma Fase de Singletos Aleatórios (**RSP**, do inglês *Random Singlet Phase*), no limite termodinâmico. Os resultados exatos, particularmente, referem-se à cadeia dXX que corresponde a  $\Delta = 0$ ; neste cenário, construímos um algoritmo genérico para cálculo de funções correlação, estáticas e dinâmicas, bem como para calcular de maneira exata a entropia de emaranhamento, por meio do método da matriz correlação. Essa solução exata nos permitiu “calibrar” a aplicabilidade do grupo de renormalização cuja receita geral apresentamos e discutimos: o Grupo de Renormalização de Desordem Forte (SDRG) foi aplicado ao problema em mãos. Verificamos que o SDRG é bem sucedido na descrição das propriedades estáticas investigadas, enquanto o tratamento da dinâmica se mostra impreciso, visto que no primeiro caso as soluções exatas apresentam compatibilidade, porém no segundo a disparidade é muito mais importante.

Uma vez que nossas soluções exatas se restringiram ao caso  $\Delta = 0$ , convém submeter os nossos resultados no caso  $\Delta \neq 0$  ao escrutínio de técnicas consagradas para tratar problemas unidimensionais, como o **DMRG** [26] e algoritmos *Monte Carlo*[27, 28]. Em face da dificuldade encontrada no caso dinâmico, sugerimos que as excitações de vizinhos próximos podem se tornar importantes com o tempo e que, mesmo em regime estático, os acoplamentos de grandeza comparável podem enfraquecer a precisão do RG durante um passo no qual o dímero com maior *gap* esteja, e.g., imediatamente ao lado daquele com o segundo maior. Enfatizamos que essas limitações se mostraram no tratamento de sistemas que, podemos dizer, estão algo na fronteira entre o *bulk* em limite termodinâmico e os sistemas finitos, legitimando talvez o questionamento das propriedades tratarem de fenômenos de *crossover*. No entanto, o acordo obtido para a carga central efetiva seria um indício de que nossos métodos são aplicáveis a sistemas grandes, bem como o fato de que a descrição estática das correlações para a cadeia dXX, via SDRG, encontra-se ressonante aos resultados outrora obtidos de maneira exata.

## Apêndice A - Operadores Fundamentais

### Matrizes de Pauli

As matrizes de Pauli são definidas como

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

É fácil ver que estas matrizes satisfazem as seguintes propriedades,

**A1 - São hermitianas.**

**A2 -  $(\sigma^x)^2 = (\sigma^y)^2 = (\sigma^z)^2 = 1$ .**

**A3 - Possuem traço nulo.**

**A4 -  $\det(\sigma^z) = \det(\sigma^y) = \det(\sigma^x) = -1$ .**

**A5 -  $\{\sigma^i, \sigma^j\} = (\sigma^i \sigma^j + \sigma^j \sigma^i) = 2\delta_{ij}$ ,  $i, j = \{x, y, z\}$ .**

**A6 - Têm autovalores iguais a  $\pm 1$ .**

**A7 - Os autoestados de  $\sigma^z$  são  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$  e  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ .**

### Operadores Levantamento e Abaixamento

Os operadores levantamento e abaixamento são definidos como

$$\sigma^+ = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\sigma^- = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

respectivamente.

A justificativa do nome que se dá a estes operadores é facilmente apreciada observando-se a atuação destes nos autoestados. É conveniente representarmos  $|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ , que cor-

responde ao estado com spin para cima e  $|\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ , que corresponde ao estado com spin para baixo. Deste modo, vemos que

$$\sigma^+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle,$$

$$\sigma^- |\downarrow\rangle = 0,$$

$$\sigma^- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle,$$

e

$$\sigma^+ |\uparrow\rangle = 0.$$

Nota-se também que, escrevendo  $\langle\uparrow| = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}$ ,  $\langle\downarrow| = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix}$ , podemos representar (a verificação é imediata)

$$\sigma^+ = |\uparrow\rangle \langle\downarrow|$$

$$\sigma^- = |\downarrow\rangle \langle\uparrow|$$

### Álgebra dos operadores $\sigma^\pm, \sigma^x, \sigma^y$ e $\sigma^z$

**A8** -  $(\sigma^+)^\dagger = \sigma^-$ .

**A9** -  $(\sigma^\pm)^2 = 0$ .

**A10** -  $\sigma^x = \sigma^+ + \sigma^-$

**A11** -  $\sigma^y = i(\sigma^- - \sigma^+)$ .

**A12** -  $\{\sigma^+, \sigma^-\} = 1$ .

**A13** -  $[\sigma^+, \sigma^-] = (\sigma^+ \sigma^- - \sigma^- \sigma^+) = \sigma^z$ .

**A14** -  $(\sigma^\pm \sigma^\mp)^n = \sigma^\pm \sigma^\mp = \frac{1 \pm \sigma^z}{2}, n \in \mathbb{N}$ .

**Prova:**

a) Note primeiramente que a propriedade A12 equivale a  $\{\sigma^\pm, \sigma^\mp\} = 1$ , logo

$$\sigma^\pm \sigma^\mp = 1 - \sigma^\mp \sigma^\pm.$$

Multiplicando tudo por  $\sigma^\pm \sigma^\mp$  pela esquerda (obteríamos o mesmo se multiplicássemos pela direita)

$$(\sigma^\pm \sigma^\mp)^2 = \sigma^\pm \sigma^\mp - \sigma^\pm (\sigma^\mp)^2 \sigma^\pm.$$

Mas, por A9 isso equivale a

$$(\sigma^\pm \sigma^\mp)^2 = \sigma^\pm \sigma^\mp.$$

Facilmente se conclui, por indução, que

$$(\sigma^\pm \sigma^\mp)^n = \sigma^\pm \sigma^\mp.$$

b) Utilizando A12 e A13, vemos que

$$\{\sigma^\pm, \sigma^\mp\} + [\sigma^\pm, \sigma^\mp] = 2(\sigma^\pm \sigma^\mp) = 1 \pm \sigma^z.$$

**A15** -  $[\sigma^\pm, \sigma^z] = \mp 2\sigma^\pm.$

## Referências

- [1] Assa Auerbach. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Graduate Texts in Contemporary Physics. Berlin: Springer-Verlag, 1994.
- [2] H. Bethe, *Zur Theorie der Metalle*, Z. Phys. vol. 71, p. 205, 2005.
- [3] J. Voit, *One-dimensional Fermi liquids*, Rep. Prog. Phys., vol. 58, p. 977, 1995.
- [4] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. New York: Academic, 1982.
- [5] F. Iglói and C. Monthus. *Strong disorder RG approach of random systems*. Phys. Rep., vol. 412, p. 277, 2005.
- [6] D. S. Fisher. *Random antiferromagnetic quantum spin chains*. Phys. Rev. B, vol. 50, p. 3799, 1994.
- [7] C. Dasgupta, S. Ma, *Low-Temperature properties of the random Heisenberg antiferromagnetic chain*, Phys. Rev. B, vol. 22, p. 1305, 1980.
- [8] M. Mourigal, M. Enderle, A. Klöpperpieper, J. S. Caux, A. Stunault, and H. M. Rønnow. *Fractional spinon excitations in the quantum Heisenberg antiferromagnetic chain*. Nature Physics, vol. 9, p. 435, 2013.
- [9] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, New York: Cambridge University Press, 2000.
- [10] P. Di Francesco, P. Mathieu and D. Senechal, *Conformal Field Theory*, New York: Springer-Verlag, 1997.
- [11] P. Calabrese and J. Cardy, *Entanglement entropy and conformal field theory*, J. Phys. A: Math. Theor., vol. 42, 504005, 2009.
- [12] C. Holzhey, F. Larsen, and F. Wilczek, *Geometric and renormalized entropy in conformal field theory*, Nucl. Phys. B, vol. 424, p. 443, 1994.
- [13] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, *Entanglement in Quantum Critical Phenomena*, Phys. Rev. Lett., vol. 90, p. 227902, 2003.

- [14] Dagotto, T. M. Rice, *Surprises on the Way from One- to Two-Dimensional Quantum Magnets: The Ladder Materials*, Science, vol. 271, p. 618, 1996.
- [15] I. Affleck and A. W. W. Ludwig, *Universal noninteger ground-state degeneracy in critical quantum systems*, Phys. Rev. Lett., vol. 67, p. 161, 1991.
- [16] Nicolas Laflorencie, *Scaling of entanglement entropy in the random singlet phase*, Phys. Rev. B, vol. 72, 140408(R), 2005.
- [17] G. Refael, J.E. Moore, *Entanglement entropy of random quantum critical points in one dimension*. Phys. Rev. Lett., vol. 93, 260602, 2004.
- [18] Eisert, Jens & Cramer, Marcus & Plenio, M., *Colloquium: Area laws for the entanglement entropy*. Rev. Mod. Phys., vol. 82, p. 277, 2010.
- [19] P. Jordan und E. Wigner, Z. Physik, vol. 47, p. 631, 1928.
- [20] E. Lieb, T. Schultz & D. Mattis, *Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain*, Ann. Phys., vol. 16, p. 407, 1961.
- [21] Gerald D. Mahan, *Many-Particle Physics*, New York: Springer, 2000.
- [22] J. I. Latorre, A. Riera, *A short review on entanglement in quantum spin systems*, J. Phys. A: Math. Theor., vol. 42, 504002, 2009.
- [23] P. Helenius and S. M. Girvin. *Numerical study of the random dimerized XX spin -1/2 chain*, Phys. Rev. B, vol. 57, 11457, 1998.
- [24] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [25] J. C. Xavier, José A. Hoyos, and E. Miranda, *Adaptive density matrix renormalization group for disordered systems*, Phys. Rev. B, vol. 98, 195115, 2018.
- [26] U. Schollwöck, *The density-matrix renormalization group*, Rev. Mod. Phys., vol. 77, p. 259, 2005.
- [27] Raimundo R. dos Santos, *Introduction to Quantum Monte Carlo Simulations for Fermionic Systems*, Braz. J. Phys., vol. 33, p. 36, 2003.

- [28] Yu-Rong Shu et al., *Properties of the random-singlet phase: From the disordered Heisenberg chain to an amorphous valence-bond solid*, Phys. Rev. B, vol. 94, 174442, 2016.