

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

INSTITUTO DE FÍSICA

Flávia Braga Ramos

Propriedades estáticas e dinâmicas de sistemas fortemente correlacionados

Uberlândia

2017

Flávia Braga Ramos

Propriedades estáticas e dinâmicas de sistemas fortemente correlacionados

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação do Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia para a obtenção do título de Doutor.

Orientador: José Cândido Xavier

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA

INSTITUTO DE FÍSICA

Uberlândia

2017

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

R175p
2017

Ramos, Flávia Braga, 1988-
Propriedades estáticas e dinâmicas de sistemas fortemente correlacionados / Flávia Braga Ramos. - 2017.
125 f. : il.

Orientador: José Cândido Xavier.
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Física.
Inclui bibliografia.

1. Física - Teses. 2. Mecânica quântica - Teses. 3. Schrodinger, Equação de - Teses. 4. Sistemas abertos (Física) - Teses. I. Xavier, José Cândido. II. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDU: 53

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

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais por não medirem esforços e sempre me apoiarem para que eu chegasse até esta etapa da minha vida sem nunca questionar minhas escolhas.

Meu profundo e sincero agradecimento ao José Cândido Xavier, meu orientador. A trajetória do nosso trabalho começou no início de 2007 durante meu primeiro período de graduação em Física. Com muita paciência e dedicação ele meu orientou sempre exigindo de mim o melhor que eu posso fazer. Com certeza, o caminho que percorri dentro do âmbito acadêmico foi muito mais agradável tendo ele ao meu lado. Além da sua contribuição em minha formação profissional, ele me ensinou coisas que somente o tempo e a experiência de vida podem proporcionar ao ser humano. Ele me lapidou, enquanto sujeito, me ensinando sobre caráter, ética, postura e companheirismo.

A todos os professores do Instituto de Física. Eles foram de grande importância na minha formação acadêmica, estando sempre dispostos a disseminar seus conhecimentos.

Aos meus amigos pelo apoio e incentivo durante meu Doutorado. Em especial, agradeço à Priscila por ser a pessoa que incansavelmente me ouviu quando eu precisava conversar, por me dar o seu ombro quando eu precisava chorar e por muitas vezes me mostrar a razão quando a mesma me faltava.

A 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

Neste trabalho, investigamos propriedades estáticas e dinâmicas de sistemas fortemente correlacionados quase-unidimensionais. A principal técnica utilizada no estudo de tais sistemas foi o grupo de renormalização da matriz de densidade. Neste contexto, um dos sistemas que consideramos foram as escadas de Heisenberg de N pernas com spin-s. Para estas escadas, investigamos propriedades estáticas, tais como energia por sítio no limite termodinâmico e gap de spin. Em particular, verificamos a validade da conjectura de Haldane-Sénéchal-Sierra para o comportamento do gap de spin das escadas de Heisenberg. Ainda para sistemas com geometria de escadas, outro problema que analisamos foi a entropia de emaranhamento de escadas quânticas críticas. Neste caso, propusemos uma conjectura para o comportamento de escala desta entropia. A fim de verificar nossa conjectura, consideramos as escadas férmions livres, de Heisenberg e escadas de Ising quânticas. Por fim, investigamos o comportamento das correlações dinâmicas de sistemas fortemente correlacionados unidimensionais. Para este caso, apresentamos um estudo detalhado do comportamento assintótico das autocorrelações de spin dinâmicas no *bulk* e na borda de tais sistemas.

Palavras-chave: Sistemas fortemente correlacionados, DMRG, escadas quânticas, entropia de emaranhamento, correlações dinâmicas.

Abstract

In this work, we investigated static and dynamical properties of quasi-one-dimensional strongly correlated systems. The main technique used in the study of such systems was the density matrix renormalization group. In this context, one of the systems that we considered were the spin-s N-leg Heisenberg ladders. For these ladders, we investigated static properties, such as the energy per site in the thermodynamic limit and the spin gap. In particular, we checked the validity of the Haldane-Sénéchal-Sierra's conjecture for the spin gap behavior of the Heisenberg ladders. Also for systems with ladders geometry, another problem that we analyzed was the entanglement entropy of quantum critical ladders. In this case, we proposed a conjecture for the scaling behavior of this entropy. In order to check our conjecture, we consider free fermions, Heisenberg ladders and quantum Ising ladders. Finally, we investigated the behavior of the dynamical correlations in one-dimensional strongly correlated systems. For this case, we presented a detailed study of the asymptotic behavior of the dynamical spin autocorrelations at the bulk and the boundary of such systems.

Keywords: Strongly correlated systems, DMRG, quantum ladders, entanglement entropy, dynamical correlations.

Lista de Figuras

1.1 Representação esquemática de uma cadeia (superbloco) do ponto de vista do DMRG. O superbloco é composto de duas partes: sistema e reservatório. 9

1.2 Representação esquemática dos passos i e $i+1$ do algoritmo infinito. Note que o bloco A (B) do passo $i+1$ (i) é construído a partir do sistema (reservatório) do passo i $(i+1)$. Em termos matemáticos, este fato é expressado pelas equações (1.1) e (1.2). 11

1.3 Fator de estrutura dinâmico de um sistema descrito pelo modelo de Heisenberg unidimensional de spin-$\frac{1}{2}$. O lado esquerdo da figura é o resultado experimental determinado através da técnica de espalhamento inelástico de nêutrons. O lado direito da figura é o fator de estrutura dinâmico de dois e quatro *spinons* determinado teoricamente. Esta figura foi extraída da referência [87]. 14

1.4 Ilustração do espaço de estados efetivo construído durante a evolução temporal do estado inicial $|\psi(0)\rangle$ usando o tDMRG estático. Neste método o estado $|\psi(0)\rangle$ e a hamiltoniana $\hat{H}(t)$ são construídos considerando a base restrita fornecida pelo algoritmo infinito do DMRG que melhor representa $|\psi(0)\rangle$ (área roxa). A linha sólida representa a evolução temporal verdadeira quando todo o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é levado em conta. 16

1.5 Ilustração do espaço de estados efetivo construído durante a evolução temporal do estado inicial $|\psi(0)\rangle$ usando o tDMRG dinâmico (área roxa). Neste método o estado $|\psi(0)\rangle$ e a hamiltoniana $\hat{H}(t)$ são construídos considerando a base restrita fornecida pelo algoritmo infinito do DMRG usando, como estados alvo na construção da matriz de densidade, todos os estados evoluídos no tempo $|\psi(k\delta t)\rangle$ (veja o texto). A linha sólida representa a evolução temporal verdadeira quando todo o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é levado em conta. 18

1.6 Representação esquemática da separação da hamiltoniana $\hat{H}$ em duas partes $\hat{H}_I$ e $\hat{H}_P$ de uma cadeia de seis sítios. A hamiltoniana $\hat{H}_I$ $\left(\hat{H}_P\right)$ contém somente as ligações ímpares (pares). 19

1.7 Ilustração do espaço de estados efetivo construído durante a evolução do estado inicial $|\psi(0)\rangle$ usando o tDMRG adaptativo (área roxa). Neste método a base restrita obtida a partir da informação da matriz de densidade é continuamente adaptada para representar bem o estado $|\psi(t)\rangle$ em qualquer ponto da evolução temporal. A linha sólida representa a evolução temporal verdadeira quando todo o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é levado em conta. 21

1.8 Ilustração do algoritmo do tDMRG adaptativo mostrando um passo de tempo δt durante a evolução temporal usando uma decomposição de Suzuki-Trotter de segunda ordem. Os passos descritos no algoritmo do tDMRG são especificados nesta figura (veja o texto). O operador de evolução temporal $e^{-i\hat{h}_{2j-1,2j}\delta t/2}$ é aplicado somente nas ligações ímpares nos passos 3 e 5, e o operador $e^{-i\hat{h}_{2j,2j+1}\delta t}$ é aplicado apenas nas ligações pares (passo 4). Nesta figura, indicamos com seta a ligação no qual é aplicado o operador de dois corpos para cada passo da varredura. Note que em algumas iterações não é feita nenhuma aplicação no sistema, neste caso é feito somente a mudança de base do estado alvo. 23

2.1 Representação esquemática de uma escada de N pernas composta por N cadeias de tamanho L no ponto de vista do DMRG. Os círculos representam os sítios, as linhas sólidas representam as interações de primeiros vizinhos e as linhas tracejadas são as interações de longo alcance. Os sítios cobertos por roxo (verde) correspondem aos blocos A (B) no contexto do DMRG e os círculos preenchidos (abertos) são os sítios centrais (renormalizados). 25

2.2 Estrutura dos compostos $SrCu_2O_3$ e $Sr_2Cu_3O_5$ que são realizações da escadas de Heisenberg de spin-$\frac{1}{2}$ com duas e três pernas, respectivamente. Os círculos preenchidos na figura representam os íons de cobre Cu^{2+} e os íons de oxigênio O^{2-} estão localizados nas bordas dos quadrados delineados pelas linhas sólidas na figura. Para estes compostos, as escadas são consideradas desacopladas devido ao fato de que as interações Cu-O-Cu que formam um ângulo 180° (90°) são antiferromagnéticas (ferromagnéticas) fortes (fracas). Esta figura foi extraída da referência [125]. 27

2.3 Ilustração do crescimento da escada de Heisenberg de três pernas no algoritmo do DMRG de sistema infinito. A notação dos símbolos é a mesma da figura 2.1. . 28

2.4 Energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de N pernas $\frac{e_\infty^N}{s^2}$ em função de $\frac{1}{N}$ para spins até $s = \frac{5}{2}$ (veja a legenda). As linhas tracejadas são os ajustes de nossos dados usando a equação (2.3) (veja o texto). 30

2.5 (a) Gráfico na escala log-linear de $2\left|\langle S^z_{1,j}\rangle\right|/s$ para cadeias com $L = 400$ e spin $s = 1$ e 2. O gráfico inserido no gráfico principal mostra nossos resultados na escala linear-linear de $2\left|\langle S^z_{1,j}\rangle\right|/s$ para três valores de s. (b) $2N\left|\langle S^z_{1,j}\rangle\right|/s$ em função de j para algumas escadas de tamanho $L = 60$ com spins 1 e 2 (veja a legenda). (c) $2N\left|\langle S^z_{1,j}\rangle\right|/\left(s-\frac{1}{2}\right)$ em função de j para escadas com spins $\frac{3}{2}$ e $\frac{5}{2}$. (d) Valores de $\langle S^z_{1,j}\rangle$ medidos nos dois primeiros degraus de escadas com spins inteiros. O tamanho das setas indica a magnitude de $\langle S^z_{1,j}\rangle$. A escala usada é também apresentada. 32

2.6 Os gráficos (a), (b), (c) e (d) mostram o gap de tamanho finito $\Delta(L)$ como função de $\frac{1}{L}$ para as escadas de Heisenberg de N pernas e spin-s com spins $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ e 1, respectivamente. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas tracejadas nessas figuras conectam os pontos ajustados (veja o texto). O gráfico inserido no gráfico principal na figura (b) é uma ampliação da região próxima de zero. . . . 33

2.7 Excitação de spin $\Delta E\,(S^z_{\rm tot})$ em função de $\frac{1}{L}$ da escada de Heisenberg de três pernas para alguns valores de $S^z_{\rm tot}$ e spin (a) $s = 1$, (b) $s = 2$ e (c) $s = \frac{3}{2}$. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas tracejadas conectam os pontos ajustados (veja o texto). Os gráficos inseridos nos gráficos principais são uma ampliação da região próxima de zero. 35

3.1 Ilustração de uma escada de seis pernas dividida em dois blocos emaranhados. Em (a) o subsistema $\mathcal{A}$ está imerso no meio do sistema e em (b) o subsistema $\mathcal{A}$ está na canto da escada. Indicamos também nesta figura os rótulos dos sítios. . 39

3.2 A relação de dispersão da escada de férmions livres de quatro pernas com tamanho 4×750 para diferentes condições de contorno. As linhas tracejadas horizontais indicam a posição dos níveis de Fermi para três valores de densidade ρ. Indicamos também os valores de N_{gl} associados com cada densidade. Note que alguns ramos são degenerados. 41

3.3 $S(\ell)$ em função de ℓ para as escadas de férmions livres. (a) Resultados para um *cluster* 4×750 e três valores de densidade. O gráfico inserido no gráfico principal mostra $S(\ell)$ para poucos sítios. A fim de apresentar todos os dados na mesma figura, adicionamos algumas constantes aos valores de S. (b) Dados da EE para diversos valores de N e preenchimento meio. Através do ajuste dos dados, obtivemos $A = 0,56$ e $B = 0,37$. As constantes a_j são pequenas e variam de -0,04 até -0,01. (c) Resultados para escadas de vinte e quarenta pernas no caso de $\rho = \frac{1}{2}$. Os símbolos em (a) e (b) são os dados obtidos pelo método da matriz de correlação (veja o texto) e as linhas sólidas conectam os pontos ajustados usando nossa conjectura [equação (3.4)]. 42

3.4 (a) $S(\ell)$ para as escadas de Heisenberg com spin $s = \frac{1}{2}$ e $s = \frac{3}{2}$. Os símbolos são dados obtidos usando o grupo de renormalização da matriz de densidade e as linhas sólidas conectam os pontos ajustados usando nossa conjectura [equação (3.4)] com $c = 1$ e $N_{gl} = 1$. A partir dos ajustes, obtivemos $A = 0,27$ e $B = 0,16$ para $s = \frac{1}{2}$. O gráfico inserido no gráfico principal mostra $S(\ell)$ para poucos sítios. (b) $S\left(\ell = \frac{NL}{2}\right) - AN - B$ em função de $-\frac{1}{6}\ln\left[\text{sen}\left(\frac{\pi}{L}\right)\right]$ para diversos tamanhos de *clusters* com spin-$\frac{1}{2}$. 44

3.5 Ilustração do diagrama de fases do modelo quântico de Ising unidimensional à temperatura nula. A transição de fase ocorre no ponto crítico $\lambda_c = 1$ de um estado em que os spins estão alinhados paralelamente ao longo do eixo z para um estado de spins alinhados paralelamente ao longo do eixo x. 45

3.6 (a) Estimativas de tamanho finito do ponto crítico $\lambda_c(N, L)$ em função de $\frac{1}{L}$ para escadas de Ising com duas e três pernas. O gráfico inserido no gráfico principal mostra $\lambda_c(N)$ em função de $\frac{1}{N}$. (b) $S(\ell)$ versus ℓ para três valores de N nos pontos críticos. Os símbolos são nossos resultados obtidos usando o DMRG e as linhas sólidas conectam os pontos ajustados pela equação 3.4 com $c = \frac{1}{2}$ e $N_{gl} = 1$. A fim de apresentar todos os dados nesta figura adicionamos algumas constantes nos valores de S. O gráfico inserido no gráfico principal mostra $S(\ell)$ para poucos sítios. 46

4.1 Componente longitudinal da correlação estática $\left(C^{\parallel}_{jl}\right)$ de uma cadeia de férmions livres em função de l para $L = 300$, $j = 1$ e $\rho = 1/2$. Os símbolos nesta figura são os resultados obtidos numericamente usando o DMRG e a linha sólida conecta os pontos determinados analiticamente através da equação (4.25). 52

4.2 Componente longitudinal da autocorrelação dinâmica da borda ($j = 1$) e do *bulk* ($j = L/2$) de uma cadeia de Heisenberg XX com 300 sítios. Estes dados foram extraídos usando a equação (4.34). A fim de apresentar todos os dados nesta figura, multiplicamos por 15 os valores de $C^{\parallel}_{j=1}$. 54

4.3 Ilustração de uma linearização da relação de dispersão $\varepsilon(k)$ em torno do momento de Fermi k_F. O alcance da validade da aproximação linear de $\varepsilon(k)$ é denotado por Λ. 55

4.4 As diferenças entre as partes reais dos resultados exatos [equação (4.34)] e os dados do tDMRG para as autocorrelações $C^{\parallel}(t, j)$ da cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$ com $L = 300$ e $\Delta = 0$. O caso de *bulk* (borda) corresponde à $j = L/2$ ($j = 1$). Consideramos $m = 200$ no processo de truncamento do tDMRG e um passo de tempo de $\delta t = 0,1$. A fim de mostrar os dados de *bulk* e borda na mesma figura, multiplicamos os resultados de $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$ por 10^{-2}. 60

4.5 Partes reais das autocorrelações $C^{\parallel/\perp}_{\text{borda}/bulk}(t)$ em função do tempo t para a cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$ com $\Delta = 0,6$, $L = 300$ e $m = 200$. Usamos $\delta t = 0,1$ e $\delta t = 0,025$ para a autocorrelação de spin longitudinal e transversal, respectivamente. Os símbolos são os dados do tDMRG e as linhas sólidas são os ajustes dos nossos dados usando as equações (4.52)-(4.55) (veja o texto). 61

4.6 Parte real da componente longitudinal da autocorrelação de spin $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$ em função de t para a cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$ com anisotropia $\Delta = 0,8$ e $L = 300$. Os dados foram obtidos usando 200 estados retidos e um passo de tempo de $\delta t = 0,1$. Ajustamos os dados do tDMRG usando a equação (4.52) considerando o parâmetro ξ livre ou fixo ($\xi = K$). 62

4.7 (a) Fator de estrutura de spin longitudinal da cadeia de Heisenberg de spin-$\frac{1}{2}$ com anisotropia $\Delta = -0,25$ e $L = 300$. Os dados foram obtidos usando $m = 200$ e $\delta t = 0,1$. (b) Formas de linha de $S^{\parallel}(q = 0,9\pi, \omega)$ obtidas para diferentes valores de tempo máximo. 64

4.8 O fator de estrutura de spin longitudinal para cadeias críticas XXZ com spin-s. (a) Resultados para $s = 1$ e $\Delta = -0,1$ e (b) para $s = \frac{3}{2}$ e $\Delta = 0,3$. 66

4.9 O fator de estrutura de spin longitudinal para a cadeia XXZ de spin-1 com anisotropia de íon simples para $\Delta = -0,1$ e $D = -1$. 66

4.10 Parte real da autocorrelação de spin $C^{\parallel}_{bulk}(t)$ em função de t para a cadeia de spin-1 com $\Delta = -0,1$, $D = -1$ e $L = 300$. Os símbolos são os dados numéricos obtidos pelo tDMRG e a linha sólida é o ajuste dos dados usando a equação (4.58). Através do ajuste dos dados obtivemos as frequências $W_1 = 1,55$ e $W_2 = 1,11$ e os expoentes $\beta_1 = 1,57$ e $\beta_2 = 1,76$. 67

4.11 Parte real da componente longitudinal da autocorrelação de spin $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$ em função do tempo para a cadeia de spin-1 com $\Delta = -0,1$, $D = -1$ e $L = 300$. Os símbolos são resultados do tDMRG e as linhas sólidas são ajustes destes resultados. Os dados foram obtidos usando $m = 350$ e $\delta t = 0,1$. (a) Ajuste dos dados numéricos considerando um decaimento de lei de potência da amplitude das oscilações de $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$ [equação (4.59)]. (b) Ajuste dos dados considerando um decaimento exponencial destas oscilações [equação (4.60)]. 69

4.12 Resultados da componente longitudinal da autocorrelação $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$ depois de subtrair o termo não oscilante $\frac{A'_1}{t^2}$. O prefator $A'_1 = 2,233$ foi obtido de maneira independente (veja texto). A inclinação da linha vermelha é aproximadamente -0,053. 70

A.1 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 $L = 4$. 77
A.2 Representação esquemática do crescimento da cadeia de acordo com o algoritmo infinito. 80
A.3 Representação esquemática de varredura, no algoritmo finito do DMRG. 84

B.1 Relação de dispersão de uma cadeia de férmions livres com $L = 30$ e condições de contorno periódicas. Os círculos preenchidos (abertos) representam estados ocupados (desocupados) do sistema. 87
B.2 Relação de dispersão de uma escada de férmions livres de tamanho 3×30 com condições de contorno periódicas (abertas) ao longo das cadeias (degraus). Os círculos preenchidos (abertos) representam estados ocupados (desocupados) do sistema. 88

Lista de Tabelas

2.1 Estimativa da energia do estado fundamental por sítio para as escadas de Heisenberg de N pernas e spin-s. Os resultados entre parênteses são algumas das melhores estimativas encontradas na literatura. As estimativas da energia do estado fundamental por sítio do sistema bidimensional no limite termodinâmico são obtidas através de uma extrapolação (veja o texto). 29

2.2 Estimativas do gap de spin Δ_s para as escadas de Heisenberg com até seis pernas e $s \leq \frac{5}{2}$. Estes valores foram extraídos a partir do ajuste de nossos dados usando a equação (2.5). Os resultados entre parênteses são algumas das melhores estimativas conhecidas da literatura. 35

4.1 Valores do parâmetro ξ e da frequência de oscilação W das autocorrelações de spin $C^{\parallel/\perp}_{\text{borda}/bulk}(t)$ para alguns valores de anisotropia Δ da cadeia de Heisenberg XXZ com spin-$\frac{1}{2}$. Os parâmetros ξ e W foram obtidos ajustando os dados do tDMRG usando as equações (4.52)-(4.55). Na última coluna desta tabela mostramos a previsão teórica para estes parâmetros. 62

Sumário

Introdução **1**

1 O grupo de renormalização da matriz de densidade dependente do tempo **7**
1.1 Mudança de base da função de onda 10
1.2 O DMRG dependente do tempo 12
tDMRG estático 15
tDMRG dinâmico 17
tDMRG adaptativo baseado na decomposição de Suzuki-Trotter 17

2 As escadas de Heisenberg de N pernas **24**
2.1 Resultados 28
Energia do estado fundamental por sítio: e_∞^N 28
Gap de spin: Δ_s 30

3 Entropia de emaranhamento de escadas quânticas **37**
3.1 Escadas de férmions livres 40
3.2 Escadas de Heisenberg 43
3.3 Escadas de Ising quânticas 43

4 Correlações dinâmicas em sistemas quânticos unidimensionais **47**
4.1 Cadeia de Heisenberg XX 48
Correlações longitudinais estáticas da cadeia de Heisenberg XX 50
Autocorrelações longitudinais dinâmicas da cadeia de Heisenberg XX 52
4.2 Previsões da teoria de campos para a autocorrelação de spin de sistemas críticos 55
4.3 Resultados numéricos para cadeias de spins 58
Modelo integrável de spin-$\frac{1}{2}$ 58
Efeitos de estados ligados e bandas quase planas 61
Cadeias de spin-s 64

Conclusões e perspectivas futuras **71**

A Grupo de Renormalização da matriz de densidade **76**
A.1 Algoritmo infinito 79
A.2 Algoritmo finito 82

B Correção de tamanho finito da energia do estado fundamental de escadas de férmions livres **86**

C Método da matriz de correlação **90**

Referências Bibliográficas **93**

Introdução

Para descrever as propriedades físicas de um dado sistema de interesse, em mecânica quântica, é necessário resolver a equação de Schrödinger, associada a tal sistema, dada por:

$$\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle. \tag{1}$$

A princípio, se desejamos descrever um material isolado sem nenhuma aproximação, devemos considerar a seguinte hamiltoniana:

$$\hat{H} = -\sum_{j=1}^{N_e}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_j^2 - \sum_{\alpha=1}^{N_i}\frac{\hbar^2}{2M_\alpha}\nabla_\alpha^2 - \sum_{j=1}^{N_e}\sum_{\alpha=1}^{N_i}\frac{Z_\alpha e^2}{|\vec{r}_j - \vec{R}_\alpha|} + \sum_{j=1}^{N_e}\sum_{k>j}^{N_e}\frac{e^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_k|} + \sum_{\alpha=1}^{N_i}\sum_{\beta>\alpha}^{N_i}\frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|}, \tag{2}$$

sendo os dois primeiros termos os operadores de energia cinética associada à todos os elétrons (N_e) e os núcleos (N_i) que compõem o material, respectivamente. Os demais termos da equação (2) representam as interações Coulombianas entre tais componentes.[1] Os símbolos Z_α e M_α são o número atômico e a massa atômica do α-ésimo núcleo, $\vec{R}_\alpha$ é a posição deste núcleo, e e m são a carga e massa do elétron e $\vec{r}_j$ a posição do j-ésimo elétron.

Em geral, estamos interessados em descrever propriedades físicas de sistemas que possuem muitos componentes (elétrons e núcleos). Tipicamente, desejamos estudar sistemas compostos por um mol de átomos. Para este caso, obter a solução da equação de Schrödinger considerando a hamiltoniana (2) consiste em resolver uma equação diferencial com da ordem de 10^{23} variáveis. Este problema é intratável com as técnicas analíticas e numéricas existentes. Neste sentido, físicos teóricos criam modelos efetivos com hamiltonianas simplificadas para que seja possível estudar sistemas com muitos graus de liberdade. É importante ressaltar que as hamiltonianas efetivas propostas devem conter todas as interações relevantes para que a descrição física do sistema seja feita corretamente.

No contexto da Física da Matéria Condensada, a primeira teoria de sucesso usada no estudo de metais e isolantes foi a teoria de bandas. Esta teoria é baseada em um modelo efetivo que considera elétrons livres que interagem com um potencial periódico devido ao arranjo cristalino do material. A distinção entre metais e isolantes à temperatura nula, segundo

[1] Outros termos de interações decorrentes de correções relativísticas podem ser considerados [1].

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 da teoria de bandas 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 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 sugerirem que uma forte interação Coulombiana entre os elétrons poderia dar origem ao comportamento isolante [2, 3]. 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.

Em particular, neste trabalho, estudaremos sistemas fortemente correlacionados quase-unidimensionais. É importante mencionar que o estudo de sistemas em baixas dimensões não é apenas um interesse teórico fundamental, visto que podemos encontrar na natureza diversos materiais de dimensão D que podem ser descritos por modelos efetivos de dimensões menores D' ($D' < D$). Um exemplo de composto tridimensional que se comporta unidimensionalmente é composto Sr_2CuO_3 [4]. Neste composto, uma forte interação de troca antiferromagnética entre os íons de cobre (Cu^{2+}) é dominante em comparação às demais interações, fazendo com que o composto possa ser descrito efetivamente por um modelo unidimensional. Mais particularmente, este composto é uma realização experimental da cadeia de Heisenberg de spin-$\frac{1}{2}$. Além disso, vale ressaltar que, devido ao recente progresso em manipulação de redes ópticas [5–7], é possível obter realizações experimentais de modelos de baixas dimensões (veja por exemplo a referência [8]).

O modelo de Heisenberg é um dos modelos mais célebres de modelos fortemente correlacionados [9]. Este modelo foi proposto no surgimento da mecânica quântica para explicar o ferromagnetismo. Existem vários outros modelos que o generalizam, tais como o modelo de Hubbard [9] e o modelo de Kondo na rede ferromagnética [10], sendo este último amplamente utilizado para explicar a magnetorresistência colossal em manganitas [11]. O prêmio Nobel de física de 2007 foi exatamente devido a descoberta deste 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 [12–21]. 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 podem 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 [22].

Em contrapartida, as técnicas numéricas de Diagonalização Exata (DE) [23], juntamente com o Grupo de Renormalização da Matriz de Densidade (do inglês *Density Matrix Renormalization Group* - DMRG) [24, 25] (veja também [26, 27]), são exemplos de técnicas numéricas usadas no estudo de sistemas fortemente correlacionados quase-unidimensionais a temperatura $T = 0$K.[2] Estas técnicas podem ser aplicadas na investigação de diversos 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 de um truncamento sistemático do espaço de Hilbert, esta técnica permite o estudo de sistemas grandes de uma forma controlada.

Originalmente, o DMRG foi formulado para descrever precisamente propriedades estáticas de sistemas quânticos em $T = 0$K. Logo após seu desenvolvimento, extensões deste método foram propostas para o estudo de sistemas que evoluem no tempo [30–38], bem como para o caso de $T \neq 0$K [39]. A formulação destas extensões forneceu uma maneira de simular propriedades físicas que são experimentalmente observadas, por exemplo o fator de estrutura dinâmico. Vale a pena mencionar que a maior parte dos resultados apresentados nesta tese foram obtidos através do DMRG.

Neste trabalho, focaremos no estudo de três problemas específicos, sendo eles a determinação: (i) de propriedades estáticas das escadas de Heisenberg de N pernas [40], (ii) do comportamento de escala da entropia de emaranhamento (EE) de escadas quânticas críticas [41] e (iii) das correlações dinâmicas de sistemas fortemente correlacionados unidimensionais [42]. A seguir discutiremos brevemente cada problema indicando o capítulo em que se encontra os respectivos resultados.

No capítulo 2, apresentaremos um estudo de propriedades estáticas das escadas de Heisenberg de N pernas com spin-s. Há duas grandes motivações para estudar materiais com geometria de escadas. Primeiramente, sistemas de escadas fornecem um cenário para o estudo de supercondutores de alta temperatura crítica (T_c), visto que algumas escadas apresentam um gap de spin no espectro de energia (Δ_s) na ausência de buracos [43]. O gap de spin é definido como o custo de energia finito, no limite termodinâmico, 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.* [44] encontraram teoricamente a existência de um gap de spin finito para as escadas de Heisenberg de duas pernas com

[2] A técnica de Monte Carlo pode também ser usada, contudo ela falha para sistemas frustrados devido ao bem conhecido problema do sinal fermiônico [28, 29].

spin-$\frac{1}{2}$. A segunda motivação do estudo de sistemas de escadas está relacionada com as realizações experimentais das escadas de N pernas, procurando pelas duas principais predições: a existência de um gap de spin finito e uma assinatura de supercondutividade [43, 45, 125].

Especificamente, as propriedades estáticas das escadas de Heisenberg que estudamos foram a energia do estado fundamental por sítio no limite termodinâmico $\left(e_{\infty}^{N}\right)$, o gap de spin (Δ_s) e efeitos de spins de borda (S_{borda}). Como já mencionado, detalhes de nossos resultados das escadas de Heisenberg são apresentados no capítulo 2.

O segundo problema estudado nesta tese foi o comportamento da entropia de emaranhamento de escadas quânticas críticas. O emaranhamento é um fenômeno puramente quântico que ocorre quando os componentes que constituem um sistema estão conectados entre si, tal que qualquer medida realizada em um componente individual afeta todos os outros. Isto acontece devido ao fato do estado que representa o sistema como um todo estar em uma superposição de estados quânticos de seus componentes. Neste contexto, vale a pena mencionar que Haroche e Wineland foram laureados com o prêmio Nobel de 2012 pelo desenvolvimento de métodos que possibilitam medir e manipular componentes individuais sem destruir a natureza quântica do estado do sistema (estado de superposição) [46–49].

Na última década, diversos quantificadores de emaranhamento têm sido propostos no estudo de sistemas de muitos corpos [50]. Para o caso de estados puros, a EE é um dos quantificadores mais utilizados, devido à sua sensitividade às correlações de longo alcance. Essencialmente, a entropia de emaranhamento é uma medida padrão de sistemas compostos por dois subsistemas, $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$, e está associada à maneira que estes subsistemas são inter-relacionados. Em termos matemáticos, um estado puro do sistema é dito não emaranhado se ele pode ser escrito como um estado produto associado aos dois subsistemas, isto é, $|\psi\rangle_{\mathcal{A}\oplus\mathcal{B}} = |\psi\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |\psi\rangle_{\mathcal{B}}$. Neste caso, a entropia de emaranhamento $S_{\mathcal{A}}$ é nula. Por outro lado, se $|\psi\rangle_{\mathcal{A}\oplus\mathcal{B}} \neq |\psi\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |\psi\rangle_{\mathcal{B}}$ o estado é emaranhado e $S_{\mathcal{A}} \neq 0$.

O comportamento de escala da EE de sistemas unidimensionais que são invariantes conforme (IC) pode ser entendido dentro do contexto da teoria de campos conforme [51]. Tipicamente, a entropia de emaranhamento exibe dois comportamentos distintos para sistemas IC compostos pelos subsistemas $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ de tamanhos ℓ e $L-\ell$, respectivamente. A distinção entre os comportamentos de $S_{\mathcal{A}}$ é governada pela fase quântica em que o sistema se encontra. Para sistemas não críticos,[3] a EE tende a um valor finito na medida que ℓ aumenta. Este comportamento está de acordo com a lei entrópica da área [53]. Esta lei diz que deveríamos esperar $S_{\mathcal{A}} \sim \ell^{D-1}$ para um sistema de dimensão D. De fato, para sistemas unidimensionais

[3]Sistemas não críticos são sistemas que apresentam, no limite termodinâmico, um gap de energia finito e não nulo ($\Delta \neq 0$) entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Já em sistemas críticos o gap é nulo. Uma das implicações em sistemas no regime crítico é que o decaimento das funções de correlações decaem com lei de potência de maneira universal [52].

$S_{\mathcal{A}}$ é uma constante, segundo esta lei. Por outro lado, uma violação da lei entrópica da área tem sido observada para diversos sistemas críticos ou próximos de pontos críticos [53–62]. Para estes casos, uma divergência logarítmica da EE é observada. Baseado em teoria de campos conforme, é encontrado que o comportamento de $S_{\mathcal{A}}$, para o estado fundamental de sistemas críticos unidimensionais, é universal e está associado com a classe de universalidade do sistema caracterizada pela carga central c [63] (veja também as referências [54, 64, 65])[4]. Motivados pelas características da entropia de emaranhamento de sistemas unidimensionais mencionadas acima, resolvemos estudar tal propriedade para o caso de sistemas críticos com geometria de escadas. Para tanto, proporemos uma conjectura para o comportamento de escala da EE destes sistemas. Para verificar nossa conjectura, usaremos como sistemas de estudo escadas de férmions livres, escadas de Heisenberg e escadas quânticas de Ising. Surpreendentemente, encontramos que o comportamento de escala da EE destas escadas é universal e está associada à classe de universalidade das cadeias que as compõem. Mais detalhes deste estudo são encontrados no capítulo 3.

Por fim, o último problema discutido nesta tese é o comportamento das correlações dinâmicas de sistemas fortemente correlacionados unidimensionais. Muitos efeitos observados em sistemas fortemente correlacionados podem ser entendidos dentro da teoria de líquidos quânticos [67–77]. Particularmente, a teoria de líquido de Luttinger (LL) tem sido usada no estudo de vários sistemas interagentes em uma dimensão [70–75]. Dentro da teoria de LL, as oscilações coletivas destes sistemas são entendidas como excitações partícula-buraco de baixas energias ao redor do momento de Fermi (k_F). Para estudar estas excitações, uma aproximação linear da relação de dispersão do sistema [$\varepsilon(k)$] é feita em torno de k_F, tal que o alcance da validade desta aproximação determina o intervalo de energia das excitações. Neste contexto, propriedades físicas que dependem somente de contribuições de baixas energias podem ser completamente descritas pelo parâmetro de Luttinger[5] (K) e pela velocidade das excitações coletivas (ϵ). Entretanto, diversas propriedades não podem ser descritas corretamente considerando somente as excitações de baixas energias, por exemplo correlações de spin dinâmicas. Para estes casos, diversas extensões da teoria de LL, que levam em conta a curvatura de $\varepsilon(k)$, são usadas para descrever tais propriedades. Estas extensões são coletivamente conhecidas como teoria de Luttinger não linear (nLL). Note que o mapeamento de sistemas interagentes em modelos de líquidos quânticos é uma maneira de estudar analiticamente estes sistemas. Outra forma de estudar tais sistemas é através de uma abordagem

[4] A classe de universalidade de sistemas unidimensionais críticos invariantes conforme é rotulada pela carga central. Sistemas que estão na mesma classe de universalidade apresentam comportamentos semelhantes independentemente da natureza das interações que descrevem tais sistemas. Pode-se, por exemplo, calcular a carga central investigando as correções de tamanho finito da energia do estado fundamental e da entropia de emaranhamento (veja por exemplo as referências [54, 66]).

[5] O parâmetro de Luttinger é adimensional e seu valor depende das interações existentes no sistema.

numérica. Especificamente, muitos destes problemas podem ser convenientemente tratados pelo DMRG e suas extensões. Em geral, as previsões baseadas nas teorias mencionadas acima necessitam de uma verificação numérica. Isto se deve ao fato de que é necessário confirmar se as aproximações consideradas na teoria são as adequadas para uma descrição correta do sistema.

Neste sentido, apresentaremos no capítulo 4, uma previsão do comportamento assintótico das autocorrelações de spin dinâmicas de sistemas fortemente correlacionados unidimensionais. A previsão apresentada neste capítulo é baseada em um modelo efetivo de impureza dentro contexto de nLL. Vale a pena mencionar que este trabalho foi desenvolvido em colaboração com R. G. Pereira e I. S. Eliëns. Nossa principal contribuição no trabalho foi o estudo numérico destes sistemas feito através do método adaptativo do DMRG dependente do tempo.

Esta tese está organizada em quatro capítulos e três apêndices. No capítulo 1, discutimos algumas extensões do DMRG utilizadas no estudo de sistemas fora do equilíbrio. Em particular, focaremos principalmente no método adaptativo do DMRG dependente do tempo desenvolvido por Feiguin e White [32, 33], sendo este o método que usamos para o cálculo das propriedades dinâmicas. Nos capítulos 2, 3 e 4 apresentamos nossos resultados dos três problemas mencionados acima. Por fim, fizemos uma conclusão geral dos resultados encontrados e apontamos nossas perspectivas para pesquisas futuras. Os apêndices presentes nesta tese foram feitos para dar suporte aos capítulos mencionados anteriormente. No apêndice A, descrevemos a técnica do DMRG, visto que esta técnica é fundamental para o entendimento do capítulo 1. No apêndice B, mostramos as correções de tamanho finito da energia do estado fundamental das escadas de férmions livres. Estas correções são úteis para o entendimento do comportamento de escala das escadas de Heisenberg em função do número de pernas. Finalmente, no apêndice C apresentamos o método da matriz de correlação usado para determinar a entropia de emaranhamento das escadas de férmions livres.

Capítulo 1

O grupo de renormalização da matriz de densidade dependente do tempo

A fim de determinar as propriedades físicas de um sistema de partículas é necessário calcularmos as energias e os autoestados de uma dada hamiltoniana. O uso de técnicas numéricas para determinar estas energias é útil, visto que muitos dos sistemas de interesse não possuem solução analítica conhecida, conforme mencionado na introdução.

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

Os esforços no desenvolvimento e implementação de técnicas numéricas concentram-se na tentativa de estudar sistemas cada vez maiores, pois em geral estamos interessados em propriedades de sistemas 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 via técnicas de diagonalização exata. Desse modo, é necessário que seja feito um truncamento deste espaço sem que haja perdas na descrição das propriedades físicas de interesse em sistemas no limite termodinâmico.

A primeira técnica de sucesso baseada no truncamento do espaço de Hilbert foi o Grupo de Renormalização Numérico (do inglês *Numerical Renormalization Group* - NRG) desenvolvido por Wilson [78]. Inicialmente, o NRG mostrou-se bastante promissor levando Wilson a ganhar o prêmio Nobel, em 1982, ao resolver o problema Kondo utilizando tal técnica. A ideia central por trás do NRG é que estados correspondentes a altas energias não são importantes na descrição física de baixas energias. Isto sugere que podemos construir um sistema a partir

de subsistemas menores, nos quais somente graus de liberdade associados a baixas energias são retidos.

Depois do sucesso de Wilson, houve um considerável interesse em aplicar o NRG em outros problemas. Em particular, parecia que diversos modelos quânticos (tais como o modelo de Hubbard e o modelo de Heisenberg) poderiam ser tratados pelo NRG. Era esperado que esta técnica produziria resultados pelo menos qualitativamente confiáveis para outros modelos. Infelizmente, a aproximação provou não ser confiável, particularmente em comparação com outros métodos numéricos, tais como Monte Carlo e DE.

Motivado pelos problemas de acurácia surgidos no estudo de sistemas quânticos usando o NRG, White criou o DMRG [24, 25]. Usando o teorema da decomposição do valor singular, ele mostrou que os estados que devem ser considerados no processo de truncamento do espaço de Hilbert são os autoestados com maiores autovalores da matriz de densidade reduzida do sistema.[1]

Desde sua formulação, a aproximação do grupo de renormalização da matriz de densidade tem sido vastamente usada em uma variedade de problemas em diversos campos de física quântica e até mesmo em química quântica. Por exemplo, o DMRG é usado no estudo de sistemas de spins quase-unidimensionais (tais como cadeias e escadas de spin), sistemas fermiônicos e bosônicos, modelos desordenados, moléculas e sistemas bidimensionais [79, 80]. Neste sentido, nas duas últimas décadas, este método tem se estabelecido como o método mais poderoso no estudo de sistemas fortemente correlacionados em baixas dimensões. Vale a pena mencionar que muitas das aplicações do DMRG são discutidas nos artigos de revisão de Schollwöck [79] e de Hallberg [80].

Uma vez que o DMRG é capaz de descrever bem propriedades estáticas de sistemas fortemente correlacionados, diversas extensões desta técnica foram propostas para o estudo de propriedades físicas que dependem do tempo, por exemplo o tDMRG[2] estático proposto por Cazalilla e Marston [30], o tDMRG dinâmico proposto por Luo *et al.* [31] e o tDMRG adaptativo baseado na decomposição de Suzuki-Trotter proposto por Feiguin e White [33, 81] (veja também a referência [82]). Outras extensões do DMRG para o cálculo de propriedades dinâmicas podem ser encontradas nas referências [34–38].

A ideia central do DMRG é usar os autoestados da matriz de densidade reduzida para renormalizar um sistema cujo tamanho cresce iterativamente; daí o nome renormalização da matriz de densidade. Do ponto de vista deste método, uma rede de L sítios é dividida em duas partes: o sistema e o reservatório. Especificamente, o sistema (reservatório) é constituído por um bloco A (B) mais um sítio (veja a figura 1.1). O conjunto dessas duas

[1] Uma revisão do DMRG é apresentada no apêndice A.

[2] Do inglês *time-dependent Density Matrix Renormalization Group.*

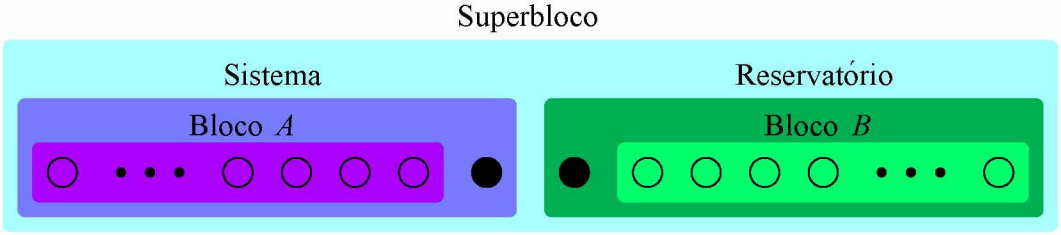


Figura 1.1: Representação esquemática de uma cadeia (superbloco) do ponto de vista do DMRG. O superbloco é composto de duas partes: sistema e reservatório.

partes (sistema + reservatório) é denominado universo ou superbloco. Neste contexto, a formulação da parte estática do DMRG é dividida basicamente em dois algoritmos, sendo eles os algoritmos infinito e finito. A principal diferença entre estes algoritmos está associada ao procedimento em que os blocos, que constituem o superbloco, variam de tamanho durante o processo iterativo.

Ao longo desta tese, mostraremos vários resultados obtidos pelo DMRG no estudo de propriedades estáticas de sistemas fortemente correlacionados, tais como energia, entropia de emaranhamento e funções de correlação. Além disso, apresentaremos também resultados de propriedades dinâmicas de sistemas unidimensionais baseados no grupo de renormalização da matriz de densidade dependente do tempo. Em termos técnicos, a implementação do tDMRG é relativamente simples uma vez que a parte estática do método (DMRG) estiver implementada e bem entendida. Pretendemos, neste capítulo, expor a versão do tDMRG que usamos como ferramenta de estudo, sendo ela o tDMRG adaptativo baseado na decomposição de Suzuki-Trotter [32, 33]. Para um melhor entendimento do que será abordado adiante, fizemos no apêndice A uma apresentação do DMRG. O texto encontrado neste apêndice é uma versão resumida de um trabalho nosso já publicado [83]. Recomendamos fortemente uma leitura prévia deste apêndice para que os tópicos abordados a seguir fiquem mais claros.

O tDMRG adaptativo baseado na decomposição de Suzuki-Trotter proposto por Feiguin e White, assim como outras versões do tDMRG, é uma extensão do algoritmo finito do DMRG. É bem conhecido que o esforço computacional no estudo de sistemas finitos usando o DMRG pode ser reduzido consideravelmente fazendo uma mudança de base da função de onda [84]. Enquanto que no DMRG esta mudança de base funciona somente como uma otimização do código, no tDMRG adaptativo ela é extremamente necessária, conforme veremos adiante. Em razão disso, antes de apresentarmos a versão do tDMRG que estamos interessados, discutiremos o procedimento de mudança de base usado por este método.

1.1 Mudança de base da função de onda

O maior consumo de tempo na execução do algoritmo do DMRG é a diagonalização iterativa da hamiltoniana do superbloco. Isto acontece devido ao fato de serem necessários vários passos do método de Lanczos [85] para que as energias de interesse sejam convergidas com uma boa acurácia. Tipicamente, são necessárias aproximadamente 200 iterações deste método para que a energia seja convergida com uma precisão de 10^{-12}. No contexto do algoritmo finito DMRG é possível fornecer um bom chute inicial[3] para o primeiro estado do método de Lanczos, de modo que o número de iterações de tal método diminui substancialmente [84]. Uma ideia de chute inicial bastante natural dentro da estrutura do DMRG é usar, no processo de varredura do algoritmo finito, a função de onda do superbloco do passo i ($|\psi^i\rangle$) como estado inicial do método de Lanczos no passo $i+1$. Entretanto, $|\psi^i\rangle$ está em uma base diferente do superbloco no passo $i+1$, sendo este caracterizado pela hamiltoniana ${}^{i+1}H_{A\bullet\bullet B}$. Assim, é necessário que seja feita uma mudança de base em $|\psi^i\rangle$ para a base de ${}^{i+1}H_{A\bullet\bullet B}$. A seguir, descreveremos como é feita esta mudança.

Vamos considerar $|s_k\rangle$ os estados do sítio k e $|\alpha_i\rangle$ os estados do bloco do sistema no passo i, sendo i o sítio mais à direita do bloco. Dessa forma, os estados do bloco do sistema no passo $i+1$ são dados por:

$$|\alpha_{i+1}\rangle = \sum_{\alpha_i, s_{i+1}} {}^{i}O^{e}[s_{i+1}]_{\alpha_{i+1},\alpha_i} |\alpha_i\rangle \otimes |s_{i+1}\rangle. \tag{1.1}$$

A matriz ${}^{i}O^{e}$ é a matriz de transformação utilizada no processo de truncamento do DMRG, obtida através da diagonalização da matriz de densidade reduzida do sistema no passo i (veja o apêndice A), e o elemento ${}^{i}O^{e}[s_{i+1}]_{\alpha_{i+1},\alpha_i}$ nada mais é do que a projeção $(\langle\alpha_i| \otimes \langle s_{i+1}|)\,|\alpha_{i+1}\rangle$. Analogamente, podemos escrever os estados do bloco do reservatório no passo i, denotados por $|\beta_{i+3}\rangle$, da seguinte forma:

$$|\beta_{i+3}\rangle = \sum_{s_{i+3},\beta_{i+4}} {}^{i+1}O^{d}[s_{i+3}]_{\beta_{i+3},\beta_{i+4}} |s_{i+3}\rangle \otimes |\beta_{i+4}\rangle, \tag{1.2}$$

sendo ${}^{i+1}O^{d}$ a matriz de transformação do reservatório no passo $i+1$. Vale ressaltar que é importante armazenar a matriz de transformação de cada passo do DMRG, pois o uso dela será necessário durante a mudança de base da função de onda. Note que no caso do algoritmo finito do DMRG, o sistema [reservatório] do passo i [$i+1$] representa o bloco A [B] no passo $i+1$ [i] (veja a figura 1.2).

Usando o fato que os estados da base do superbloco em um passo i são dados por:

$$|\alpha_i, s_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3}\rangle = |\alpha_i\rangle \otimes |s_{i+1}\rangle \otimes |s_{i+2}\rangle \otimes |\beta_{i+3}\rangle, \tag{1.3}$$

[3]Um bom chute inicial é aquele em que o primeiro estado do método de Lanczos seja muito próximo do estado fundamental.

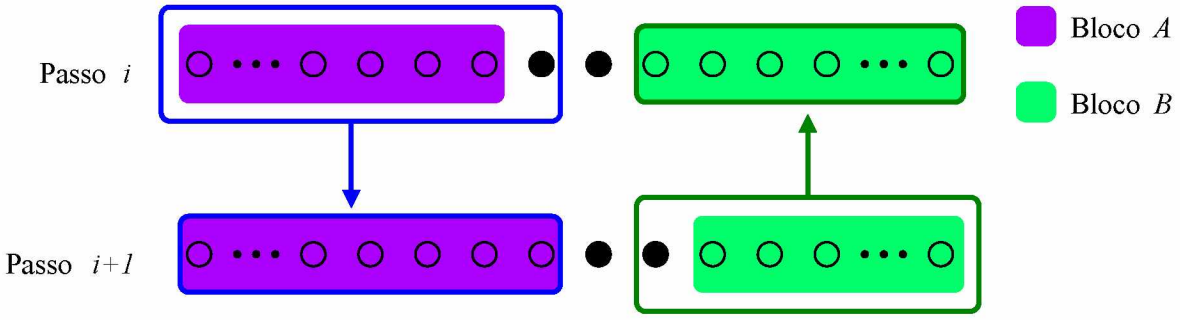


Figura 1.2: Representação esquemática dos passos i e $i+1$ do algoritmo infinito. Note que o bloco A (B) do passo $i+1$ (i) é construído a partir do sistema (reservatório) do passo i ($i+1$). Em termos matemáticos, este fato é expressado pelas equações (1.1) e (1.2).

podemos escrever a função de onda, neste passo, da seguinte forma:

$$|\psi^i\rangle = \sum_{\alpha_i, s_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3}} \psi^i(\alpha_i, s_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3}) |\alpha_i, s_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3}\rangle, \tag{1.4}$$

sendo $\psi^i(\alpha_i, s_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3})$ o coeficiente da combinação linear dos estados da base de ${}^iH_{A\bullet\bullet B}$. Utilizando as equações (1.1) e (1.2) e o fato de que $\sum_{\alpha_{i+1}} |\alpha_{i+1}\rangle\langle\alpha_{i+1}| \approx 1$, é fácil ver que:

$$|\psi^{i+1}\rangle \approx \sum_{\alpha_{i+1}, s_{i+2}, s_{i+3}, \beta_{i+4}} \left[\sum_{\alpha_i, s_{i+1}, \beta_{i+3}} \psi^i(\alpha_i, s_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3}) \, {}^iO^e[s_{i+1}]_{\alpha_{i+1}, \alpha_i} \, {}^{i+1}O^d[s_{i+3}]_{\beta_{i+3}, \beta_{i+4}} \right] \times$$

$$\times |\alpha_{i+1}\rangle \otimes |s_{i+2}\rangle \otimes |s_{i+3}\rangle \otimes |\beta_{i+4}\rangle. \tag{1.5}$$

Podemos observar na equação (1.5) que a função de onda[4] está escrita na base do superbloco no passo $i+1$. Portanto, os coeficientes da função de onda neste passo são dados por:

$$\psi^{i+1}(\alpha_{i+1}, s_{i+2}, s_{i+3}, \beta_{i+4}) \approx \sum_{\alpha_i, s_{i+1}, \beta_{i+3}} \psi^i(\alpha_i, s_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3}) \, {}^iO^e[s_{i+1}]_{\alpha_{i+1}, \alpha_i} \, {}^{i+1}O^d[s_{i+3}]_{\beta_{i+3}, \beta_{i+4}}. \tag{1.6}$$

Do ponto de vista computacional, a maneira mais eficiente de implementar a mudança de base [equação (1.6)] é primeiramente construir uma função de onda intermediária

$$\psi^{i+1}(\alpha_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3}) = \sum_{\alpha_i, s_{i+1}} \psi^i(\alpha_i, s_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3}) \, {}^iO^e[s_{i+1}]_{\alpha_{i+1}, \alpha_i}, \tag{1.7}$$

e então

[4] No caso de otimização do código do DMRG, a função de onda aproximada [equação (1.5)] é usada como chute inicial do método de Lanczos.

$$\psi^{i+1}(\alpha_{i+1}, s_{i+2}, s_{i+3}, \beta_{i+4}) = \sum_{\beta_{i+3}} \psi^{i+1}(\alpha_{i+1}, s_{i+2}, \beta_{i+3})\, {}^{i+1}O^{d}[s_{i+3}]_{\beta_{i+3},\beta_{i+4}}. \tag{1.8}$$

Em contraste ao caso da implementação direta da equação (1.6), na construção da função de onda intermediária são necessárias menos operações para calcular $\psi^{i+1}(\alpha_{i+1}, s_{i+2}, s_{i+3}, \beta_{i+4})$.

1.2 O DMRG dependente do tempo

Uma vez que detalhamos como é feita a mudança de base dentro do contexto DMRG, vamos agora apresentar o grupo de renormalização da matriz de densidade dependente do tempo. Como mencionamos anteriormente, nas últimas décadas houve um considerável progresso na formulação de métodos numéricos para estudar sistemas fortemente correlacionados em baixas dimensões. Entretanto, o estudo de sistemas com dimensão $D \geq 2$ ainda é bastante limitado devido à carência de aproximações controladas que podem ser aplicadas em tal estudo. Em contraste ao caso de sistemas bidimensionais, a formulação do DMRG forneceu uma rota precisa para descrever sistemas quase-unidimensionais. Devido à grande acurácia fornecida pelo DMRG, tem sido visto ao longo dos anos um aumento de sua aplicabilidade através da criação de extensões da técnica endereçadas à investigação das propriedades físicas de interesse. Uma notória extensão do DMRG é o tDMRG. Ao longo dos anos, diversas versões do tDMRG foram propostas para a descrição de propriedades fora do equilíbrio de sistemas fortemente correlacionados, conforme já reportado. Antes de apresentar algumas destas versões, vamos fazer uma breve digressão de como estudar sistemas dinâmicos em mecânica quântica.

Em mecânica quântica, a evolução temporal de um estado $|\psi\rangle$ é governada pela equação de Schrödinger dependente do tempo apresentada na equação (1). A solução formal desta equação é dada por:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \tag{1.9}$$

sendo $\hat{U}(t, t_0)$ um operador unitário que realiza a evolução temporal do estado $|\psi\rangle$ em um tempo inicial t_0 até um tempo posterior $t > t_0$. Este operador pode ser escrito explicitamente como

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathcal{T}\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \hat{H}(t')dt'}\right], \tag{1.10}$$

sendo $\mathcal{T}$ o operador de ordenamento temporal [86]. É importante notar que o operador $\hat{U}(t, t_0)$ contém a dinâmica completa do sistema. Em razão disso, a descrição de propriedades dinâmicas de um sistema de interesse se resume em determinar $\hat{U}(t, t_0)$ exatamente ou com boa aproximação. No caso de hamiltonianas que não dependem do tempo, o operador de

evolução temporal pode ser simplificado para

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}. \tag{1.11}$$

Por simplicidade, a partir daqui usaremos $\hbar = 1$.

Embora a solução formal da equação de Schrödinger seja conhecida e em princípio pareça bastante simples, em geral, determinar $\hat{U}(t,t_0)$ é um problema altamente não trivial. Este problema se torna ainda mais complicado se estivermos interessados em hamiltonianas dependentes do tempo. Ao longo desta tese, focaremos no estudo de sistemas isolados cujas hamiltonianas não possuem dependência temporal. Nestas condições, em geral, o estudo de estados que evoluem no tempo pode ser dividido em dois principais cenários. O primeiro cenário é baseado na construção de um estado inicial $|\psi(t=0)\rangle$ através de uma aplicação de um operador $\hat{\mathcal{O}}$ no estado fundamental $|\psi_0\rangle$ de uma dada hamiltoniana $\hat{H}_0$. Neste cenário, a evolução temporal de $|\psi(t=0)\rangle$ é realizada fazendo $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_0 t}\hat{\mathcal{O}}|\psi_0\rangle$. O segundo cenário consiste em usar o estado fundamental de uma hamiltoniana $\hat{H}_0$ como estado inicial ($|\psi(t=0)\rangle = |\psi_0\rangle$) e estudar a evolução temporal deste estado na presença de uma hamiltoniana diferente $\hat{H}_1$, isto é, $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}_1 t}|\psi_0\rangle$. Note que em ambos cenários o problema somente será um problema de dinâmica se os estados iniciais não forem estados de equilíbrio da hamiltoniana associada à evolução temporal.

Tipicamente, propriedades dinâmicas de interesse podem ser obtidas através de correlações de n pontos dependentes do tempo, por exemplo a função de Green. É importante mencionar que funções de respostas dinâmicas podem ser comparadas diretamente com resultados obtidos a partir de técnicas experimentais, tais como espalhamento inelástico de nêutrons e espalhamento inelástico de raio-X ressonante [87, 88]. A fim de ilustrar esta comparação, mostramos na figura 1.3 uma medida típica da técnica espalhamento inelástico de nêutrons em um sistema que é uma realização experimental da cadeia de Heisenberg de spin-$\frac{1}{2}$ [87]. Experimentalmente, o fator de estrutura dinâmico[5] é extraído através da medida da seção de choque diferencial do nêutron espalhado.[6] É também encontrado na figura 1.3 o fator de estrutura dinâmico determinado teoricamente.

Voltando nossa atenção para o caso de hamiltonianas independentes do tempo, é possível obter numericamente o operador $e^{-i\hat{H}(t-t_0)}$ para sistemas pequenos descritos por modelos

[5]O fator de estrutura dinâmico é definido como $S^{\alpha\alpha}(\mathbf{Q},\omega) = \int dt e^{i\omega t}\sum_j e^{-i\mathbf{Q}j}\langle S_j^\alpha(t)S_{\text{ref}}^\alpha\rangle$, sendo S_j^α a componente α ($\alpha = x,\ y,\ z$) do operador de spin que atua na posição j do sistema. A quantidade $\langle S_j^\alpha(t)S_{\text{ref}}^\alpha\rangle$ é conhecida como a componente α das correlações de spin dinâmicas do sistema. Estas correlações nos dá a informação da projeção temporal de um spin no sítio j quando uma perturbação inicial é feita no sistema num desejado sítio referencial denominado pelo índice ref.

[6]A seção de choque diferencial do nêutron espalhado se relaciona com o fator de estrutura dinâmico pela seguinte expressão: $\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \sim \sum_{\alpha=x,y,z}[g_1 f(\mathbf{Q})]\left(1-\frac{Q^\alpha Q^\alpha}{Q^2}\right)S^{\alpha\alpha}(\mathbf{Q},\omega)$, sendo $\mathbf{Q}$ a transferência de momento total, g_1 o fator de Landé e $f(\mathbf{Q})$ o fator de forma [87].

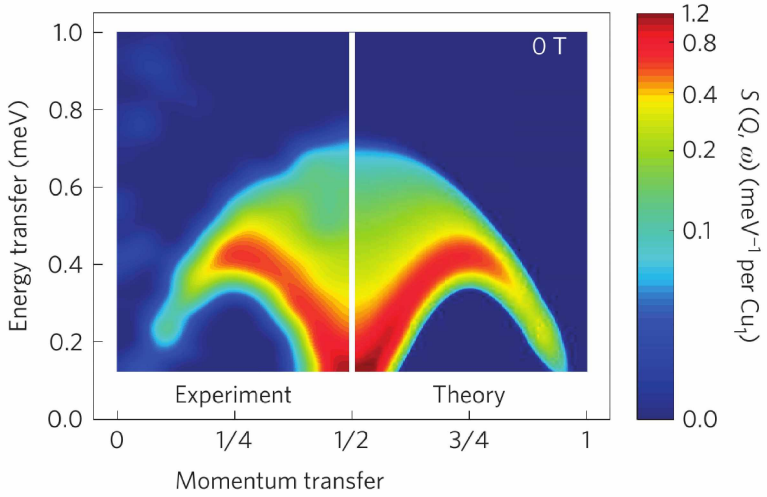


Figura 1.3: Fator de estrutura dinâmico de um sistema descrito pelo modelo de Heisenberg unidimensional de spin-$\frac{1}{2}$. O lado esquerdo da figura é o resultado experimental determinado através da técnica de espalhamento inelástico de nêutrons. O lado direito da figura é o fator de estrutura dinâmico de dois e quatro *spinons* determinado teoricamente. Esta figura foi extraída da referência [87].

mínimos, tais como o modelo de Hubbard e o modelo de Heisenberg. Todavia, para sistemas interagentes de muitos corpos, é muito complicado formular um algoritmo para determinar o operador de evolução temporal com uma precisão controlada.

Uma vez que a equação de Schrödinger é uma equação diferencial linear de primeira ordem no tempo, é razoável considerar métodos numéricos de diferenças finitas, tais como os métodos de Runge-Kutta (R-K) [89]. Particularmente, o método de Runge-Kutta de quarta ordem (R-K4) é um dos mais utilizados. No método R-K4, a evolução temporal de um estado $|\psi\rangle$ é dada por:

$$|\psi(t+\delta t)\rangle = |\psi(t)\rangle - \frac{i\delta t}{6}\left(|k_1\rangle + 2|k_2\rangle + 2|k_3\rangle + |k_4\rangle\right) + O\left(\delta t^5\right), \tag{1.12}$$

sendo, os vetores de Runge-Kutta definidos como:

$$|k_1\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle, \tag{1.13}$$

$$|k_2\rangle = \hat{H}\left(t+\frac{\delta t}{2}\right)\left(|\psi(t)\rangle + \frac{\delta t}{2}|k_1\rangle\right), \tag{1.14}$$

$$|k_3\rangle = \hat{H}\left(t+\frac{\delta t}{2}\right)\left(|\psi(t)\rangle + \frac{\delta t}{2}|k_2\rangle\right), \tag{1.15}$$

$$|k_4\rangle = \hat{H}\left(t+\delta t\right)\left(|\psi(t)\rangle + \delta t|k_3\rangle\right). \tag{1.16}$$

Esta aproximação [equação (1.12)] é similar à uma expansão de Taylor do operador $\hat{U}(\delta t) = e^{-i\hat{H}\delta t}$ até a quarta ordem de δt se a hamiltoniana é independente do tempo. Note que este

método pode ser considerado dentro do contexto do DMRG uma vez que é necessário somente o estado inicial $|\psi(t=0)\rangle$ e a hamiltoniana do superbloco. Entretanto, é importante ressaltar que os métodos de Runge-Kutta e de aproximações polinomiais para exponenciais não conservam a unitariedade e são numericamente instáveis [90]. Por esta razão, estes métodos não são os mais adequados para estudar a dinâmica de sistemas físicos. Para contornar o problema de conservação da unitariedade do operador de evolução temporal, na referência [82] Daley e colaboradores consideraram, dentro do contexto do DMRG, outro método de diferenças finitas conhecido como método de Crank-Nicolson (C-N). Neste método, a evolução temporal do estado $|\psi\rangle$ é dada por:

$$|\psi(t+\delta t)\rangle = \frac{1 - i\hat{H}(t)\delta t/2}{1 + i\hat{H}(t)\delta t/2}|\psi(t)\rangle. \tag{1.17}$$

Ainda nesta referência, os autores compararam resultados obtidos através dos métodos de Runge-Kutta e de Crank-Nicolson e encontraram que este último método fornece resultados qualitativamente melhores em relação ao método de R-K. No entanto, a principal desvantagem da aproximação de C-N reside na inversão do denominador não hermitiano da equação (1.17).

Até aqui, expusemos como estudar a dinâmica de sistemas em mecânica quântica e mencionamos brevemente métodos de diferenças finitas que podem ser utilizados dentro do DMRG para realizar a evolução temporal de estados quânticos. A seguir, apresentaremos algumas das extensões do DMRG desenvolvidas para o estudo de sistemas que evoluem no tempo.

tDMRG estático

Uma das primeiras extensões do DMRG desenvolvidas para estudar sistemas que dependem do tempo, atualmente conhecida como tDMRG estático, foi proposta por Cazalilla e Marston [30]. Para ilustrar o método, os autores aplicaram o algoritmo do tDMRG estático no estudo da dinâmica de dois sistemas: pontos quânticos e junções entre duas cadeias de férmions interagentes. Para tanto, eles consideraram como estado inicial o estado fundamental de uma dada hamiltoniana $\hat{H}_0$ e estudaram a evolução temporal deste estado associada a uma hamiltoniana $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$.

A ideia central do tDMRG estático é usar o algoritmo infinito do DMRG (veja o apêndice A) para crescer o sistema até um tamanho desejado e então determinar o estado inicial do sistema $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_0\rangle$. Assim, tanto $|\psi_0\rangle$ quanto $\hat{H}(t)$ são representados na base estática efetiva fornecida pelo algoritmo infinito (veja a figura 1.4). Nesta extensão do DMRG, a evolução temporal é realizada utilizando o método de Runge-Kutta, mencionado anteriormente. É importante ressaltar que a evolução temporal do estado inicial acessa estados excitados

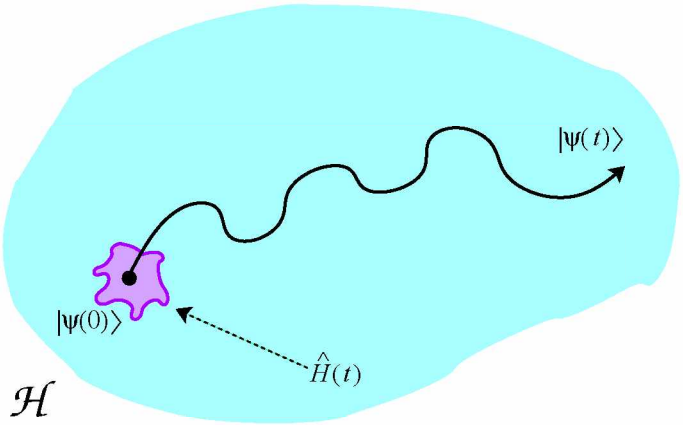


Figura 1.4: Ilustração do espaço de estados efetivo construído durante a evolução temporal do estado inicial $|\psi(0)\rangle$ usando o tDMRG estático. Neste método o estado $|\psi(0)\rangle$ e a hamiltoniana $\hat{H}(t)$ são construídos considerando a base restrita fornecida pelo algoritmo infinito do DMRG que melhor representa $|\psi(0)\rangle$ (área roxa). A linha sólida representa a evolução temporal verdadeira quando todo o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é levado em conta.

na medida em que o sistema se encontra em um regime fora do equilíbrio. Portanto, é esperada uma perda na acurácia da descrição de $|\psi(t)\rangle$ para tempos longos, uma vez que a base restrita considerada pelo método não é adequada para representar bem $|\psi(t)\rangle$ quando este estado difere significativamente de $|\psi_0\rangle$. Contudo, no sistema estudado por Cazalilla e Marston foi possível realizar a evolução temporal para tempos razoavelmente longos [30]. Esta boa performance da técnica foi possível devido à configuração específica do acoplamento dependente do tempo localizado no centro do sistema. Note que, no algoritmo infinito, os sítios centrais não são renormalizados e o acoplamento pode ser modelado exatamente. Para diferentes configurações de acoplamento é esperado que o tDMRG estático não seja eficiente mesmo para tempos relativamente curtos.

Embora o tDMRG estático tenha sido o ponto de partida para a construção de diversos algoritmos sofisticados, ele apresentou a carência de alguns ingredientes fundamentais no estudo de sistemas dinâmicos. Este método possui duas fontes principais de erro. A primeira fonte de erro está associada à escolha da base efetiva usada para representar o estado $|\psi(t)\rangle$ e a segunda fonte de erro está relacionada ao método usado pelos autores para realizar a evolução temporal (método de R-K). Neste contexto, é intuitivo pensar que uma forma de produzir resultados qualitativamente melhores, com esta técnica, seria considerar um aumento de estados que compõem a base restrita que representa $|\psi_0\rangle$. Entretanto, Luo *et al.* [31] mostraram que o aumento desta base não é suficiente para uma melhora substancial da qualidade dos resultados fornecidos pelo método.

tDMRG dinâmico

O primeiro aperfeiçoamento do método formulado por Cazalilla e Marston foi proposto por Luo, Xiang e Wang [31]. Diferentemente do tDMRG estático no qual é usado apenas um estado alvo ($|\psi_0\rangle$) para a construção da matriz de densidade reduzida do sistema, Luo e colaboradores sugeriram utilizar uma sequência de estados evoluídos no tempo ($|\psi(t=0)\rangle$, $\psi(t=\delta t)\rangle$, $|\psi(t=2\delta t)\rangle$, ..., $|\psi(t=N_t\delta t)\rangle$) como estados alvo (veja a figura 1.5). Desse modo, a matriz de densidade é então dada por:

$$\rho = \sum_{k=0}^{N_t} \alpha_k |\psi(k\delta t)\rangle\langle\psi(k\delta t)|, \tag{1.18}$$

sendo $|\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle$ e α_k o peso de cada estado alvo $|\psi(k\delta t)\rangle$ com $\sum_k \alpha_k = 1$. Uma vez que os estados $|\psi(k\delta t)\rangle$ para $k \neq 0$ não são conhecidos inicialmente, foi sugerido, dentro do contexto do algoritmo infinito, iniciar com um sistema pequeno o suficiente no qual a evolução temporal completa possa ser feita exatamente. Os estados obtidos a partir desta evolução podem então ser usados para construir o conjunto de estados que compõem a base efetiva do próximo passo do algoritmo infinito. Todo este procedimento é repetido até que o tamanho desejado do sistema seja alcançado. Note então que no tDMRG dinâmico especula-se que uma melhor base efetiva pode ser obtida para representar o sistema final levando em conta a maneira que a evolução temporal de sistemas com tamanhos intermediários explora o espaço de Hilbert. Devido à inclusão de mais estados alvo na construção da matriz de densidade, o tDMRG dinâmico mostrou-se muito mais eficaz que o tDMRG estático. Todavia, este método não é muito eficiente, uma vez que é necessário um grande número de estados para longos intervalos de tempo (N_t) e a evolução temporal completa tem que ser feita em todos os passos do DMRG.

tDMRG adaptativo baseado na decomposição de Suzuki-Trotter

O tDMRG adaptativo [32, 33] tem se mostrado a extensão mais precisa para estudar sistemas unidimensionais fora do equilíbrio. A formulação deste método foi baseada na introdução do método de dizimação de bloco dependente do tempo (do inglês *Time Evolving Block Decimation* - TEBD) feita por Vidal [91]. Resumidamente, o TEBD usa o operador de evolução temporal em tempo imaginário para projetar o estado fundamental de uma dada hamiltoniana em uma base de matriz produto. Do ponto de vista algorítmico, a estrutura do TEBD coincide com o DMRG. Neste contexto, Feiguin e White formularam o tDMRG adaptativo baseado na decomposição de Suzuki-Trotter (S-T) [32, 33]. A principal inovação

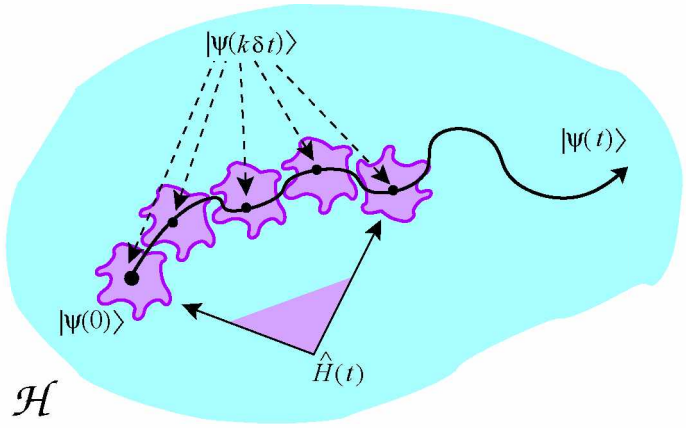


Figura 1.5: Ilustração do espaço de estados efetivo construído durante a evolução temporal do estado inicial $|\psi(0)\rangle$ usando o tDMRG dinâmico (área roxa). Neste método o estado $|\psi(0)\rangle$ e a hamiltoniana $\hat{H}(t)$ são construídos considerando a base restrita fornecida pelo algoritmo infinito do DMRG usando, como estados alvo na construção da matriz de densidade, todos os estados evoluídos no tempo $|\psi(k\delta t)\rangle$ (veja o texto). A linha sólida representa a evolução temporal verdadeira quando todo o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é levado em conta.

deste método perante ao TEBD consiste no uso da decomposição de S-T do operador de evolução temporal $e^{-i\hat{H}\delta t}$ para pequenos passos de tempo δt $\left(|\psi(t+\delta t)\rangle = e^{-i\hat{H}\delta t}|\psi(t)\rangle\right)$.

A ideia principal do tDMRG adaptativo é evoluir o estado inicial até um tempo t através de aplicações sucessivas de $e^{-i\hat{H}\delta t}$, isto é,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}\delta t}e^{-i\hat{H}\delta t}\ldots e^{-i\hat{H}\delta t}|\psi(t=0)\rangle. \tag{1.19}$$

Se a hamiltoniana que descreve um sistema unidimensional contém somente *interações entre vizinhos mais próximos*, podemos então escrevê-la em termos de hamiltonianas locais que atuam em ligações simples da seguinte forma:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{L-1}\hat{h}_{i,i+1} = \sum_{i=1}^{\frac{L-1}{2}}\hat{h}_{2i-1,2i} + \sum_{i=1}^{\frac{L-1}{2}}\hat{h}_{2i,2i+1} = \hat{H}_I + \hat{H}_P, \tag{1.20}$$

sendo L o número de sítios do sistema e $\hat{h}_{i,i+1}$ a hamiltoniana que descreve a interação entre os sítios i e $i+1$ (veja a figura 1.6). Note que todos os termos de $\hat{H}_I = \sum_i \hat{h}_{2i-1,2i}$ e de $\hat{H}_P = \sum_i \hat{h}_{2i,2i+1}$ comutam entre si, enquanto que as hamiltonianas locais $\hat{h}_{2i,2i+1}$ e $\hat{h}_{2j-1,2j}$, em geral, não comutam se elas compartilham o mesmo sítio, isto é, se $j = i$ ou $j = i+1$. Em razão disso, não é possível escrever exatamente $e^{-i\hat{H}\delta t}$ como um produto de exponenciais de $\hat{H}_I$ e $\hat{H}_P$ $\left(e^{-i\hat{H}\delta t} \neq e^{-i\hat{H}_I\delta t}e^{-i\hat{H}_P\delta t}\right)$. Contudo, usando a decomposição de Suzuki-Trotter é possível determinar uma aproximação para $e^{-i\hat{H}\delta t}$ em termos de $\hat{H}_I$ e $\hat{H}_P$. O erro associado a esta aproximação está relacionado com a ordem da decomposição de S-T considerada,

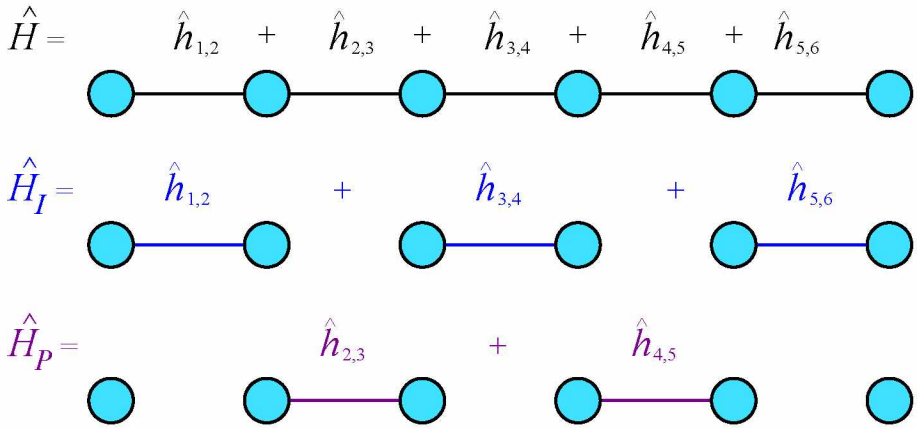


Figura 1.6: Representação esquemática da separação da hamiltoniana $\hat{H}$ em duas partes $\hat{H}_I$ e $\hat{H}_P$ de uma cadeia de seis sítios. A hamiltoniana $\hat{H}_I$ $\left(\hat{H}_P\right)$ contém somente as ligações ímpares (pares).

sendo (δt^{n+1}) o erro de uma decomposição de ordem n. É fácil mostrar que a expansão de Suzuki-Trotter do operador de evolução temporal em primeira ordem é escrita como:

$$e^{-i\hat{H}\delta t} = e^{-i\left(\hat{H}_I+\hat{H}_P\right)\delta t} = e^{-i\hat{H}_I\delta t}e^{-i\hat{H}_P\delta t} + O(\delta t^2). \tag{1.21}$$

Para o caso de decomposições de segunda e quarta ordem, o operador $e^{-i\hat{H}\delta t}$ é dado respectivamente por [92]:

$$e^{-i\hat{H}\delta t} = e^{-i\hat{H}_I\delta t/2}e^{-i\hat{H}_P\delta t}e^{-i\hat{H}_I\delta t/2} + O(\delta t^3) \tag{1.22}$$

e

$$e^{-i\hat{H}\delta t} = e^{-i\hat{H}_I\theta\delta t/2}e^{-i\hat{H}_P\theta\delta t}e^{-i\hat{H}_I(1-\theta)\delta t/2}e^{-i\hat{H}_P(1-2\theta)\delta t}e^{-i\hat{H}_I(1-\theta)\delta t/2}e^{-i\hat{H}_P\theta\delta t}e^{-i\hat{H}_I\theta\delta t/2} + O(\delta t^5) \tag{1.23}$$

sendo $\theta = 1/(2-2^{\frac{1}{3}})$.

É importante perceber que, se utilizarmos a decomposição de Suzuki-Trotter, podemos evoluir no tempo um estado $|\psi\rangle$ através de sucessivas aplicações da evolução temporal de dois sítios $e^{-\hat{h}_{i,i+1}\delta t}$ (ligação simples).[7] É possível utilizar este fato dentro do contexto do algoritmo finito do DMRG (veja o apêndice A), conforme explicaremos a seguir.

A função de onda no passo j, de uma varredura do algoritmo finito do DMRG, é escrita como:

$$|\psi^j\rangle = \sum_{\alpha_j,s_{j+1},s_{j+2},\beta_{j+3}} \psi^j_{\alpha_j,s_{j+1},s_{j+2},\beta_{j+3}}|\alpha_j\rangle|s_{j+1}\rangle|s_{j+2}\rangle|\beta_{j+3}\rangle \tag{1.24}$$

[7]Isto acontece devido ao fato de que todos os termos de $\hat{H}_I$ e $\hat{H}_P$ comutam entre si, ou seja, no caso de L par $e^{-i\hat{H}_I\delta t} = e^{-i\hat{h}_{1,2}\delta t}e^{-i\hat{h}_{3,4}\delta t}\ldots e^{-i\hat{h}_{L-1,L}\delta t}$ e $e^{-i\hat{H}_P\delta t} = e^{-i\hat{h}_{2,3}\delta t}e^{-i\hat{h}_{4,5}\delta t}\ldots e^{-i\hat{h}_{L-2,L-1}\delta t}$

sendo que $\{|\alpha_j\rangle\}$ ($\{|\beta_{j+3}\rangle\}$)[8] é a base efetiva do bloco do sistema (reservatório) e $\{|s_{j+1}\rangle\}$ e $\{|s_{j+2}\rangle\}$ formam uma base completa do $(j+1)$-ésimo e $(j+2)$-ésimo sítio, respectivamente. Desse modo, qualquer operador $\hat{\mathcal{O}}$ que atua somente nos sítios $j+1$ e $j+2$ pode ser aplicado, *exatamente*, no estado $|\psi^j\rangle$ da seguinte forma:

$$\hat{\mathcal{O}}|\psi^j\rangle = \sum_{\alpha_j,\beta_{j+3}} \sum_{s_{j+1},s_{j+2}} \sum_{s'_{j+1},s'_{j+2}} \psi_{j\alpha_j,s_{j+1},s_{j+2},\beta_{j+3}} \hat{\mathcal{O}}^{s'_{j+1},s'_{j+2}}_{s_{j+1},s_{j+2}} |\alpha_j\rangle|s'_{j+1}\rangle|s'_{j+2}\rangle|\beta_{j+3}\rangle, \qquad (1.25)$$

sendo $\hat{\mathcal{O}}^{s'_{j+1},s'_{j+2}}_{s_{j+1},s_{j+2}}$ o elemento de matriz $\langle s'_{j+1}|\langle s'_{j+2}|\hat{\mathcal{O}}|s_{j+1}\rangle|s_{j+2}\rangle$. Assim, podemos observar através da equação (1.25) que o operador de evolução temporal $e^{-\hat{h}_{j+1,j+2}\delta t}$ pode ser aplicado exatamente no passo j do processo de varredura do DMRG. Entretanto, para aplicar outros termos da decomposição de S-T (por exemplo $e^{-\hat{h}_{k+1,k+2}\delta t}$ com $k \neq j$) devemos transformar o estado para uma configuração de superbloco apropriada, tal que estes termos atuem precisamente em sítios não renormalizados do superbloco. Esta transformação pode ser realizada usando a transformação de onda passo a passo (veja a seção 1.1), comumente usado no algoritmo finito do DMRG para fornecer um bom chute inicial para o método de Lanczos. Neste contexto, note que o estado que está sendo evoluído no tempo pode ser iterativamente utilizado como estado alvo para construir a matriz de densidade, de modo que neste procedimento a base efetiva do DMRG é continuamente adaptada para melhor representar o estado $|\psi\rangle$ em qualquer ponto da evolução temporal (veja a figura 1.7). Daí o nome de tDMRG *adaptativo*.

Com a decomposição de Suzuki-Trotter em mente, podemos agora formular um algoritmo para o tDMRG adaptativo. Para tal formulação, usaremos como exemplo a evolução temporal de um estado inicial considerando a segunda ordem da decomposição de S-T [veja a equação (1.22)].

Algoritmo do tDMRG adaptativo

1. Usando o algoritmo tradicional do DMRG (algoritmo finito), encontre o estado fundamental do sistema inicial $|\psi_0\rangle$ descrito pela hamiltoniana $\hat{H}_0$. Depois que a precisão desejada da energia do estado fundamental for alcançada, termine o processo de varredura em uma das bordas do superbloco (i. e. no passo em que o bloco do sistema tem somente um sítio).

[8] Lembre que as bases que descrevem o bloco do sistema e do reservatório não são completas, contudo os estados que as compõem são os estados que melhor representam o estado $|\psi\rangle$.

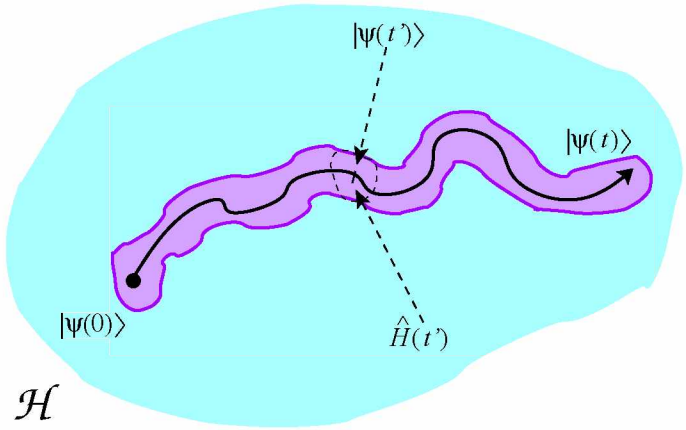


Figura 1.7: Ilustração do espaço de estados efetivo construído durante a evolução do estado inicial $|\psi(0)\rangle$ usando o tDMRG adaptativo (área roxa). Neste método a base restrita obtida a partir da informação da matriz de densidade é continuamente adaptada para representar bem o estado $|\psi(t)\rangle$ em qualquer ponto da evolução temporal. A linha sólida representa a evolução temporal verdadeira quando todo o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é levado em conta.

2. Introduza a perturbação no sistema. Isto pode ser feito modificando a hamiltoniana (e. g. mudando algum parâmetro ou adicionando um termo extra $\hat{H}_0 \to \hat{H}_0 + \hat{H}_1$) ou mudando o estado $|\psi_0\rangle$ (e. g. aplicando um dado operador $\hat{\mathcal{O}}$ no estado $|\psi_0\rangle$).

   Uma varredura completa extra pode ser usada caso a perturbação seja feita no estado $|\psi_0\rangle$, especialmente em uma situação na qual o operador $\hat{\mathcal{O}}$ é uma soma de termos agindo em um único sítio ou em uma ligação. Neste caso, cada termo de $\hat{\mathcal{O}}$ é aplicado durante a varredura quando o sítio (ligação) é um dos sítios não renormalizados (uma ligação entre dois sítios não renormalizados). Note que o estado modificado deve ser considerado como estado alvo da matriz de densidade para que ele seja bem representado.

3. A fim de aplicar $e^{-i\hat{H}_I \delta t/2}$ no estado inicial, use uma varredura completa do algoritmo do sistema finito do DMRG com as seguintes modificações:

   a) Ao invés da diagonalização do superbloco, para cada ligação ímpar aplique o operador de evolução temporal de dois corpos $e^{-i\hat{h}_{2j-1,2j}\delta t/2}$ no estado alvo. Esta operação é realizada em todos os passos da varredura nos quais os sítios não renormalizados são os sítios correspondentes à ligação descrita por $\hat{h}_{2j-1,2j}$ (veja a figura 1.6). Se a configuração do superbloco não for apropriada para esta aplicação, devemos, nesta etapa, iterar sem fazer nenhuma modificação no estado alvo. Note que, para cada aplicação de $e^{-i\hat{h}_{2j-1,2j}\delta t/2}$, um novo estado alvo é obtido.

   b) Análogo ao caso estático, realize o processo de truncamento do DMRG em cada passo da varredura obtendo uma nova base efetiva do superbloco com a matriz de

transformação correspondente.

c) Faça a transformação da função de onda para a nova base em cada passo da varredura.

4. Para aplicar $e^{-i\hat{H}_P\delta t}$, realize o passo 3 substituindo na etapa (a) o operador $e^{-i\hat{h}_{2j-1,2j}\delta t/2}$ por $e^{-i\hat{h}_{2j,2j+1}\delta t}$ e aplique este operador em cada ligação par da varredura seguindo os mesmos critérios de aplicação mencionados em 3(a).

5. Para aplicar novamente $e^{-i\hat{H}_I\delta t/2}$, repita o passo 3 sem nenhuma modificação.

6. Todos os itens acima completam um passo de tempo δt, também chamado de passo de Suzuki-Trotter [veja a equação (1.22)]. Assim, repita os passos 3-5 até que o tempo desejado seja alcançado.

Baseado no algoritmo acima, apresentamos na figura 1.8 uma ilustração do procedimento de varreduras usado no tDMRG adaptativo para fazer a evolução temporal. Note que para considerar decomposições de Suzuki-Trotter de ordem superior basta considerar um algoritmo semelhante ao algoritmo apresentado anteriormente, modificando somente o número de varreduras completas e os operadores de dois corpos aplicados. Por exemplo, no caso de uma decomposição de S-T de quarta ordem são necessárias sete varreduras completas para realizar a evolução temporal de um passo δt em um dado estado de interesse [veja a equação (1.23)]. Vale ressaltar que é possível realizar a evolução temporal de dois ou mais estados simultaneamente. Para tanto, é necessário executar todas etapas do algoritmo do tDMRG adaptativo considerando todos os estados e levando em conta todos eles na construção da matriz de densidade.

Por fim, é importante ressaltar que o tDMRG adaptativo, apresentado nesta seção, é rápido e eficiente. Contudo, em sua versão tradicional este método é restrito ao estudo de sistemas unidimensionais com apenas interações de primeiros vizinhos. No caso de sistemas com interações de curto alcance, por exemplo o modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ e escadas estreitas com interações entre vizinhos mais próximos, é conveniente combinar sítios simples dentro de um supersítio tal que a decomposição de Suzuki-Trotter possa ser aplicada exatamente nos sítios não renormalizados do DMRG. Infelizmente, este método torna-se ineficiente na medida em que é necessário combinar muitos sítios dentro do supersítio, e. g. escadas largas. Vale mencionar que apesar do tDMRG ser um método de fácil entendimento, a sua implementação é altamente não trivial, caso queira-se um código competitivo.

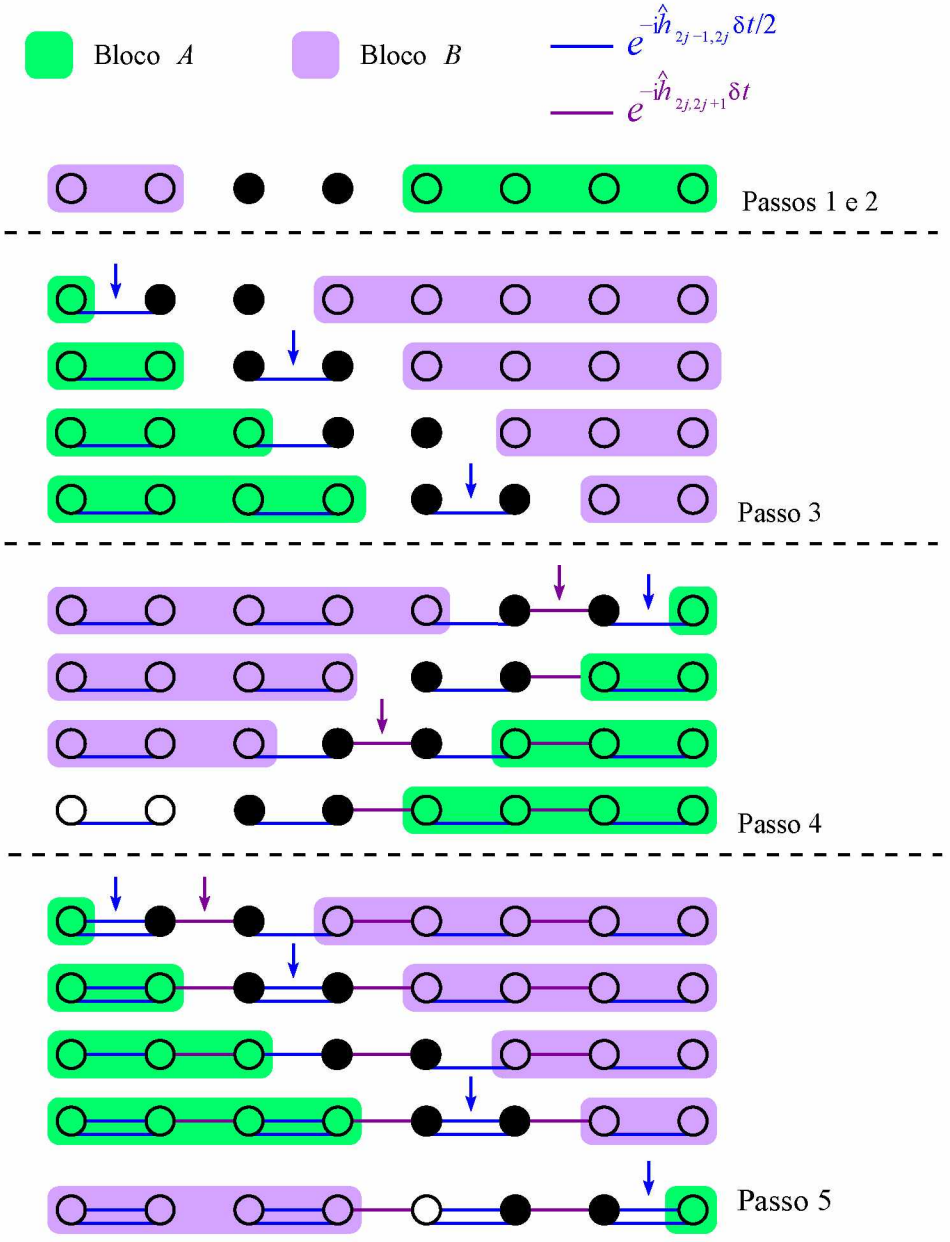


Figura 1.8: Ilustração do algoritmo do tDMRG adaptativo mostrando um passo de tempo δt durante a evolução temporal usando uma decomposição de Suzuki-Trotter de segunda ordem. Os passos descritos no algoritmo do tDMRG são especificados nesta figura (veja o texto). O operador de evolução temporal $e^{-i\hat{h}_{2j-1,2j}\delta t/2}$ é aplicado somente nas ligações ímpares nos passos 3 e 5, e o operador $e^{-i\hat{h}_{2j,2j+1}\delta t}$ é aplicado apenas nas ligações pares (passo 4). Nesta figura, indicamos com seta a ligação no qual é aplicado o operador de dois corpos para cada passo da varredura. Note que em algumas iterações não é feita nenhuma aplicação no sistema, neste caso é feito somente a mudança de base do estado alvo.

Capítulo 2

As escadas de Heisenberg de N pernas

O estudo teórico de sistemas fortemente correlacionados é sem dúvida uma tarefa extremamente complicada devido à carência de técnicas adequadas para estudar tais sistemas, especialmente em dimensões maiores que um. A principal dificuldade na investigação destes sistemas está associada ao crescimento exponencial do espaço Hilbert com o tamanho do sistema. Nas últimas décadas, um grande esforço tem sido dedicado no desenvolvimento de novas técnicas para lidar com esta questão. Embora o DMRG seja baseado em um algoritmo essencialmente unidimensional, ele tem sido aplicado no estudo de sistemas com baixas dimensões, tais como sistemas que possuem uma geometria de escada [10]. O procedimento usado no estudo de tais sistemas consiste em mapear o modelo de baixas dimensões em um modelo unidimensional com interações de longo alcance [84, 93–104]. Neste sentido, alguns outros algoritmos baseados em tensores de rede têm sido propostos para estudar sistemas com dimensão maior que $D = 1$, tais como o algoritmo de estados de pares projetados (do inglês *Projected Entangled Pair States* - PEPS) [105] e o *ansatz* de renormalização de emaranhamento de multiescala (do inglês *Multiscale Entanglement Renormalization Ansatz* - MERA) [106]. Vale ressaltar que na literatura há poucos resultados confiáveis que podem ser usados como referência para sistemas com dimensões $D > 1$.

Neste capítulo, apresentaremos resultados precisos das escadas de Heisenberg de N pernas e spin-s, com spin até $s = \frac{5}{2}$, os quais podem ser usados como referência para os novos algoritmos que têm sido propostos. Adicionalmente, e não menos importante, verificamos a conjectura Haldane-Sénéchal-Sierra [107–110], a qual prediz o comportamento do gap de spin da cadeia e das escadas de Heisenberg de spin-s. É importante mencionar que resultados preliminares foram apresentados em um trabalho nosso já publicado [83]. Por completeza, apresentaremos alguns deles neste capítulo.

O modelo de Heisenberg foi proposto no início da mecânica quântica para estudar sistemas magnéticos. Este modelo considera spins fixos em uma rede regular que representa a estru-

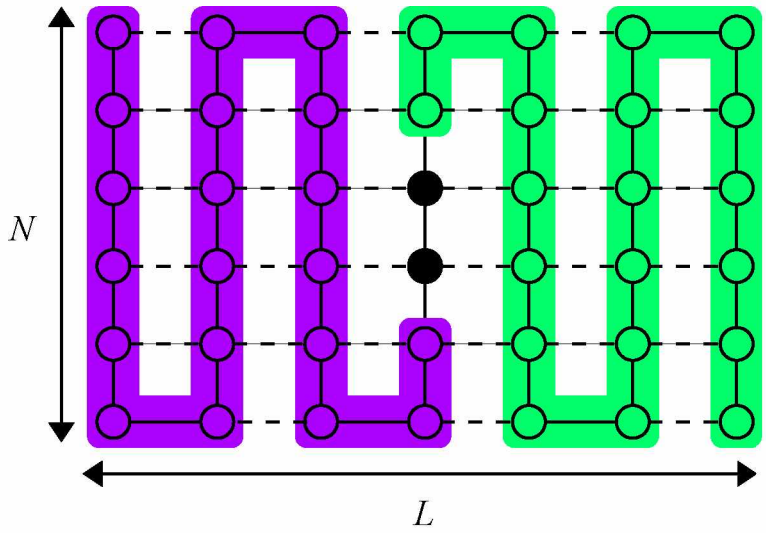


Figura 2.1: Representação esquemática de uma escada de N pernas composta por N cadeias de tamanho L no ponto de vista do DMRG. Os círculos representam os sítios, as linhas sólidas representam as interações de primeiros vizinhos e as linhas tracejadas são as interações de longo alcance. Os sítios cobertos por roxo (verde) correspondem aos blocos A (B) no contexto do DMRG e os círculos preenchidos (abertos) são os sítios centrais (renormalizados).

tura 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 negativo (positivo) dizemos que o sistema é ferromagnético (antiferromagnético), pois a energia mais baixa ocorre quando os spins se orientam paralelamente (antiparalelamente) em uma dada direção. Mesmo em dias atuais, um grande esforço teórico ainda é feito na tentativa de entender o modelo Heisenberg e suas extensões devido à riqueza de física que tal modelo apresenta [111].

Neste capítulo, estamos particularmente interessados em estudar sistemas de escadas de N pernas descritos pelo modelo de Heisenberg de spin-s. As escadas de N pernas são caracterizadas por N cadeias paralelas acopladas entre si, tal que o acoplamento J ao longo das cadeias é comparável ao acoplamento $J_\perp$ entre as cadeias, isto é, ao longo dos degraus. O caso particular de $N = 2$ motiva o nome *escada* para essa geometria. Na figura 2.1, mostramos uma representação esquemática de uma escada de tamanho $N \times L$. Do ponto de vista numérico, as escadas de N pernas são mais fáceis de tratar do que sistemas bidimensionais e são usadas como uma rota simples para estudar estes sistemas. É bem conhecido que as cadeias de Heisenberg de spin-s ($N = 1$) apresentam comportamentos distintos dependendo

do valor de s, como primeiramente apontado por Haldane [107, 108]. Usando um limite semi-clássico da cadeia de Heisenberg, Haldane notou que cadeias de spins semi-inteiros (inteiros) possuem um gap de spin nulo (finito). Esta última afirmação é conhecida como conjectura de Haldane. Embora a aproximação semiclássica seja válida somente para $s \gg 1$, esta conjectura foi verificada numericamente para spin $s \geq \frac{1}{2}$ [112–114]. Neste contexto, a mesma questão natural surge sobre o comportamento do gap de spin nas escadas de Heisenberg. Dagotto *et al.* [44] mostraram que a escada de Heisenberg de duas pernas com spin-$\frac{1}{2}$ possui um gap de spin finito. Por outro lado, Rice e colaboradores argumentaram que escadas de Heisenberg com um número ímpar (par) de pernas possuem gap de spin nulo (finito) [115]. De fato, isso foi verificado usando o DMRG [94] (veja também a referência [116]). Uma análise similar àquela feita por Haldane para as cadeias de Heisenberg de spin-s foi estendida para as escadas de Heisenberg por Sénéchal [109] e Sierra [110]. Estes autores concluíram que as escadas de Heisenberg de N pernas e spin-s possuem um gap de spin nulo (finito) se sN é semi-inteiro (inteiro).[1] Enquanto existem fortes evidências numéricas que a conjectura Haldane-Sénéchal-Sierra é válida para o caso de escadas com spin-$\frac{1}{2}$ (vejas as referências [94] e [116]), poucos trabalhos consideram o estudo de escadas com $s > \frac{1}{2}$. Particularmente, a escada de Heisenberg de N pernas de spin-1 foi estudada usando o modelo σ não linear [109, 110, 117] (veja também a referência [101]), bosonização [118, 119], Monte Carlo [120] e métodos de teoria de perturbação [121].

O estudo de escadas quânticas não é somente um artefato teórico usado na tentativa de entender sistemas bidimensionais. Compostos tais como o pirofosfato de vanadil $(VO_2)\,P_2O_7$ e alguns sistemas de cupratos, por exemplo $SrCu_2O_3$ e $Sr_2Cu_3O_5$, são realizações experimentais das escadas de Heisenberg de spin-$\frac{1}{2}$ [10]. Para fins ilustrativos, mostramos na figura 2.2 a estrutura destes dois últimos compostos mencionados. Certamente, o estudo de escadas com spins maiores é altamente desejado, não somente do ponto de vista teórico, uma vez que compostos tais como $Na_2Ni_2\,(C_2O_4)_3\,(H_2O)_2$, $\beta - CaCr_2O_4$ e $BiMn_2PO_6$ são realizações experimentais de escadas com spin-1 [122], spin-$\frac{3}{2}$ [123, 124] e spin-$\frac{5}{2}$ [126], respectivamente.

A hamiltoniana que descreve as escadas de Heisenberg de N pernas e spin-s, com condições de contorno abertas, é definida por:

$$\hat{H} = J \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{L-1} \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i,j+1} + J_{\perp} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{L} \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i+1,j}, \tag{2.1}$$

sendo L o número de sítios das cadeias, N o número de pernas e $\mathbf{S}_{i,j}$ o operador de spin-s

[1] O comportamento do gap de spin das escadas de Heisenberg pode ser entendido de uma maneira simples. Para tanto, considere um limite de forte acoplamento ao longo dos degraus, isto é, $J_{\perp} \gg J$. Neste regime, escadas com um número par (ímpar) de pernas formam estados singletos (tripletos) em cada degrau, de modo que é necessário um custo de energia finito (nulo) para fazer uma excitação no sistema.

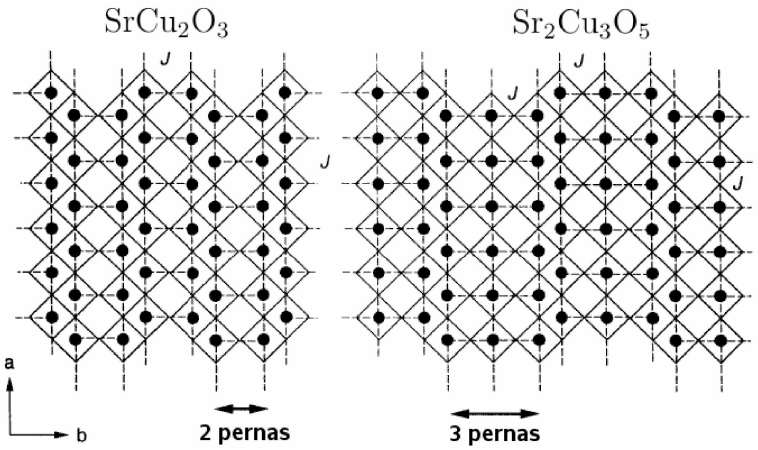


Figura 2.2: Estrutura dos compostos $SrCu_2O_3$ e $Sr_2Cu_3O_5$ que são realizações da escadas de Heisenberg de spin-$\frac{1}{2}$ com duas e três pernas, respectivamente. Os círculos preenchidos na figura representam os íons de cobre Cu^{2+} e os íons de oxigênio O^{2-} estão localizados nas bordas dos quadrados delineados pelas linhas sólidas na figura. Para estes compostos, as escadas são consideradas desacopladas devido ao fato de que as interações Cu-O-Cu que formam um ângulo 180° (90°) são antiferromagnéticas (ferromagnéticas) fortes (fracas). Esta figura foi extraída da referência [125].

que atua na $i-$ésima cadeia e $j-$ésimo degrau. Em particular, investigaremos as escadas de Heisenberg isotrópicas, isto é, $J_\perp = J$. Além disso, para fixar a escala de energia assumiremos $J_\perp = J = 1$.

A fim de investigar a hamiltoniana (2.1), usamos o algoritmo do DMRG considerando até $m = 3600$ estados retidos por bloco no final das varreduras do DMRG. O peso descartado nas varreduras finais foi tipicamente $10^{-8} - 10^{-12}$. Para evitar configurações metaestáveis, iniciamos o processo de truncamento com valores grandes de m (tipicamente iniciamos com $m_0 \sim 1200$) [127].

Ao longo deste capítulo apresentaremos nossas estimativas do gap de spin (Δ_s) e da energia do estado fundamental por sítio no limite termodinâmico $\left(e_\infty^N\right)$ para as escadas de Heisenberg de N pernas e spin-s. Mostraremos também estimativas da energia do estado fundamental por sítio do modelo de Heisenberg bidimensional de spin-s. Por fim, uma discussão de efeito de borda, similar ao que acontece na cadeia de Heisenberg de spin-1 [128], é também relatada para escadas.

Antes de apresentarmos nossos resultados, descreveremos brevemente o procedimento usado para calcular as energias de sistemas de escadas usando o DMRG. Como mencionamos anteriormente, o DMRG é uma técnica essencialmente unidimensional. Contudo, é possível mapear um *cluster* $N \times L$ em um sistema unidimensional com interações de longo alcance, como ilustrado na figura 2.1. Antes de alcançar um tamanho de *cluster* específico (como

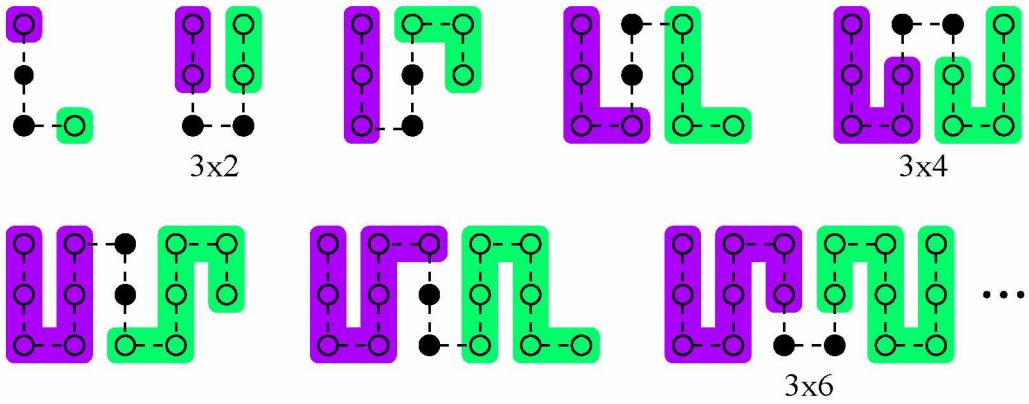


Figura 2.3: Ilustração do crescimento da escada de Heisenberg de três pernas no algoritmo do DMRG de sistema infinito. A notação dos símbolos é a mesma da figura 2.1.

aquele apresentado na figura 2.1) é preciso crescer o tamanho do sistema iniciando com quatro sítios (para mais detalhes do método veja o apêndice A). No algoritmo de sistema infinito do DMRG são adicionados dois sítios a cada iteração, como ilustrado na figura 2.3 para o caso de uma escada de três pernas. É interessante notar que, análogo ao caso unidimensional [24], podemos usar o algoritmo de sistema infinito do DMRG para estimar a energia do estado fundamental por sítio no limite termodinâmico e_∞^N das escadas de N pernas. A energia por sítio pode ser estimada através da diferença de energias de diferentes iterações. Note que algumas energias (associadas com algumas iterações) não podem ser usadas para estimar e_∞^N uma vez que nem todos os passos tem o número de sítios correto para uma geometria fixa (veja a figura 2.3). Desse modo, estimamos e_∞^N usando a seguinte equação:

$$e_\infty^N = \lim_{L\to\infty} \frac{E\left[N(L+2)\right] - E(NL)}{2N}, \tag{2.2}$$

sendo $E(M)$ a energia do estado fundamental de um sistema com M sítios.

2.1 Resultados

Energia do estado fundamental por sítio: e_∞^N

Na tabela 2.1, apresentamos nossas estimativas de e_∞^N para diversos valores de N e s. A fim de obter estas estimativas, primeiramente usamos a equação (2.2) para um valor fixo de estados retidos (m) no processo de truncamento e aumentamos L até que o valor de e_∞^N seja convergido (o número de iterações é da ordem de 1000 para valores grandes de m e N). A fim de analisar a acurácia das nossas estimativas, obtivemos outra estimativa para um valor maior de m (tipicamente duas vezes maior) e comparamos com a estimativa anterior.

Tabela 2.1: Estimativa da energia do estado fundamental por sítio para as escadas de Heisenberg de N pernas e spin-s. Os resultados entre parênteses são algumas das melhores estimativas encontradas na literatura. As estimativas da energia do estado fundamental por sítio do sistema bidimensional no limite termodinâmico são obtidas através de uma extrapolação (veja o texto).

N	$s=\frac{1}{2}$	$s=1$	$s=\frac{3}{2}$	$s=2$	$s=\frac{5}{2}$
1	-0,4431471 (-0,4431471...) [116]	-1,40148403897 (-1,4014840389) [135]	-2,828337 (-2,82833) [136]	-4,761248 (-4,7612481) [135]	-7,1924 (-7,19223) [137]
2	-0,578043140180 (-0,57802)[116]	-1,878372746	-3,930067	-6,73256	-10,2852
3	-0,600537 (-0,60063) [116]	-2,0204	-4,2718	-7,3565	-11,274
4	-0,618566 (-0,61873) [116]	-2,0957	-4,446	-7,669	-11,76
5	-0,62776 (-0,62784) [116]	-2,141	-4,553	-7,865	-12,08
6	-0.6346 (-0,6351) [116]	-2,169	-4,60	-7.94	-12,1
∞	-0.6768 (-0,66931)[138]	-2,327	-4,97	-8,62	-13,2

O número de dígitos mostrados na tabela 2.1 corresponde à acurácia da estimativa de e_∞^N obtida considerando m até 1600. Os resultados apresentados entre parênteses são algumas das melhores estimativas encontradas na literatura (veja também as referências [129–134] para resultados similares). Como podemos ver, nossas estimativas estão em perfeita concordância com os valores de e_∞^N encontrados na literatura.

Uma vez que somos capazes de obter estimativas precisas de e_∞^N para escadas com até $N = 6$, decidimos então estimar a energia do estado fundamental por sítio e_∞^{2D} do sistema bidimensional no limite termodinâmico assumindo que $e^{2D}(N, L \to \infty) = e_\infty^N$ se comporta como:

$$e_\infty^N = e_\infty^{2D} + \frac{A}{N}. \tag{2.3}$$

O comportamento acima é esperado mesmo para sistemas não interagentes. Usando a fórmula de Euler-Maclaurin é possível obter a correção de tamanho finito dominante para a escada de N pernas de férmions livres (veja o apêndice B). Para este caso, é fácil mostrar que

$$e_\infty^N = \lim_{L\to\infty} \frac{E(N,L)}{NL} = -\frac{16}{\pi^2} + \left(2 - \frac{16}{\pi^2}\right)\frac{1}{N}. \tag{2.4}$$

Note que a equação de (2.4) tem uma forma de escala análoga à equação (2.3).

Na figura 2.4, mostramos $\frac{e_\infty^N}{s^2}$ em função de $\frac{1}{N}$ para diversos valores de spins. Os símbolos nesta figura são as estimativas de e_∞^N apresentadas na tabela (2.1) e as linhas tracejadas são os ajustes dos dados numéricos usando a equação (2.3). Os valores de e_∞^{2D} adquiridos

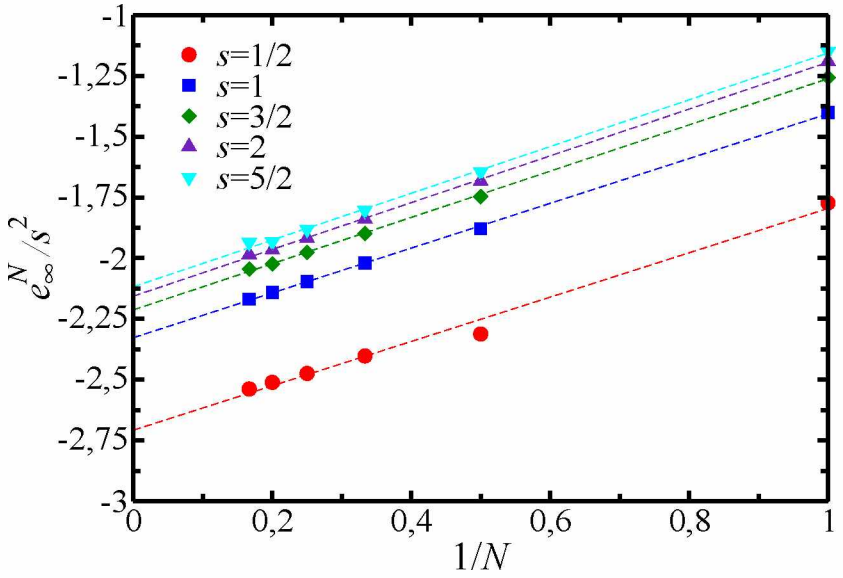


Figura 2.4: Energia do estado fundamental por sítio das escadas de Heisenberg de N pernas $\frac{e_\infty^N}{s^2}$ em função de $\frac{1}{N}$ para spins até $s = \frac{5}{2}$ (veja a legenda). As linhas tracejadas são os ajustes de nossos dados usando a equação (2.3) (veja o texto).

através do ajuste dos dados são também listados nas tabela (2.1). Como podemos ver nesta tabela, nossa estimativa para o caso de $s = \frac{1}{2}$ $\left(e_\infty^{2D} = -0,6768\right)$ está em concordância com a estimativa obtida por Wiese e Ying usando o método de Monte Carlo $\left(e_\infty^{2D} = -0,66931\right)$ [138]. A origem da pequena diferença entre estes dois valores $(0,007)$ está provavelmente associada com os valores pequenos de N usados para estimar e_∞^{2D}.

Gap de spin: Δ_s

Seja $E_0\left(S_{\text{tot}}^z\right)$ a menor energia no setor $S_{\text{tot}}^z = \sum_{i,j}\langle S_{i,j}^z\rangle$. O gap de spin é dado por $\Delta_s = E_0(n) - E_0(0)$, sendo $n = s+1$ $\left(s+\frac{1}{2}\right)$ se N é ímpar e s é inteiro (semi-inteiro) e $n = 1$ para os outros casos. Usando esta definição, obtivemos a excitação de spin correta associada com o gap de spin, como explicaremos a seguir.

É bem conhecido que o estado fundamental de cadeias de Heisenberg com *spins inteiros* $(N = 1)$ pode ser entendido pela representação VBS (do inglês *Valence Bond Solid*) [128]. Cadeias de spin-s abertas que são descritas por estados VBS tem um spin efetivo $S_{\text{borda}} = \frac{s}{2}$ em cada borda. Assim, o estado fundamental no limite termodinâmico é $(s+1)^2$ vezes degenerado. Esta degenerescência tem sido observada em cadeias de Heisenberg de spin-s (veja por exemplo a referência [139]). Devido a este fato, o gap de spin para cadeias de spin-s inteiro, sob condições de contorno abertas, deve ser calculado a partir da diferença de energia do estado de mais baixa energia no setor $S_{\text{tot}}^z = s+1$ e do estado fundamental singleto (setor

$S^z_{\rm tot} = 0$) [ou equivalentemente, $E_0(s+1) - E_0(s)$]. Esta degenerescência pode ser entendida pelo fato de que no limite termodinâmico os spins de borda não interagem entre si [139].

Analisando o termo topológico do modelo σ não linear, Ng [140] propôs que cadeias de spin-s com *spins semi-inteiros* também apresentam spins de borda de magnitude $S_{\rm borda} = \frac{1}{2}\left(s - \frac{1}{2}\right)$. De fato, estes estados de borda têm sido observados [137, 141, 142]. Devido à existência de tais estados, o gap de spin de cadeias com spins semi-inteiros é dado por $\Delta_s = E_0\left(s + \frac{1}{2}\right) - E_0(0)$.

A mais bela assinatura de estados de borda aparece em medidas de $\langle S^z_{1,j}\rangle$ no setor $S^z_{\rm tot} = s$ $\left[S^z_{\rm tot} = s - \frac{1}{2}\right]$ para spins inteiros [semi-inteiros]. Primeiramente, focaremos em resultados de spins inteiros. Apresentamos na figura 2.5(a) os valores locais de $\langle S^z_{1,j}\rangle$ para *cadeias* com $s = 1$, 2 e 3 (resultados similares podem ser encontrados nas referências [25] e [141] para $s = 1$ e 2). É claro a partir desta figura que um spin $S_{\rm borda} \cong \frac{s}{2}$ aparece na borda ($j = 1$) de cadeias de spin-s. Nestes casos, encontramos $S_{\rm borda} = 0,53$, 1,12 e 1,64 para as cadeias com $s = 1$, 2 e 3, respectivamente. Apresentamos também na figura 2.5(a) um gráfico na escala log-linear que mostra um decaimento exponencial de $\langle S^z_{1,j}\rangle$. Os comprimentos de decaimento ξ^s obtidos pelas inclinações das retas são $\xi^1 = 5,94$ e $\xi^2 = 47,5$. O comprimento de decaimento ξ^1 é muito próximo ao valor encontrado por White na referência [24] ($\xi^1 = 6,03$). Por outro lado, nossa estimativa para ξ^2 difere de duas estimativas existentes na literatura ($\xi^2 = 49,1$ e $\xi^2 = 54,3$) [133, 143].

É interessante notar o decaimento exponencial de $\langle S^z_{1,j}\rangle$ só pode ser observado quando o tamanho do sistema é maior que o comprimento de decaimento ξ^s [veja o gráfico inserido no gráfico principal da figura 2.5(a)]. Nosso resultado para o caso de $s = 3$ mostra que mesmo considerando uma cadeia de tamanho $L = 800$ não é possível observar o decaimento exponencial. Para cadeias com spins semi-inteiros nossos resultados indicam um spin de borda $S_{\rm borda} = \frac{1}{2}\left(s - \frac{1}{2}\right)$, como previsto [137, 141, 142]. Encontramos $S_{\rm borda} = 0,57$ e 0,94 para cadeias com spin $s = \frac{3}{2}$ e $s = \frac{5}{2}$, respectivamente. No caso de spins semi-inteiros, nossos resultados de $\langle S^z_{1,j}\rangle$ exibem um decaimento com lei de potência, como esperado para sistemas críticos abertos.

Um efeito de borda similar àquele que acontece em cadeias também aparece para escadas com um número *ímpar* de pernas, como retratado nas figuras 2.5(b) e 2.5(c) para spins inteiros e semi-inteiros, respectivamente. Contudo, no caso de escadas, o spin de borda $S_{\rm borda} = \sum_{j=1}^{\left[\frac{N}{2}\right]} \langle S^z_{1,j}\rangle$ ($\left[\frac{a}{k}\right]$é o maior inteiro menor ou igual a $\frac{a}{k}$) é distribuído ao longo do degrau final e diminui com o aumento de N [veja a figura 2.5(d)]. Por exemplo, para $s = 1$ encontramos $S_{\rm borda} = 0,45$, 0,33, 0,22 e 0,19 para $N = 3$, 5, 7 e 9, respectivamente. Para N par nossos resultados mostram a ausência deste efeito de borda, como podemos observar nas figuras 2.5(b) e 2.5(c).

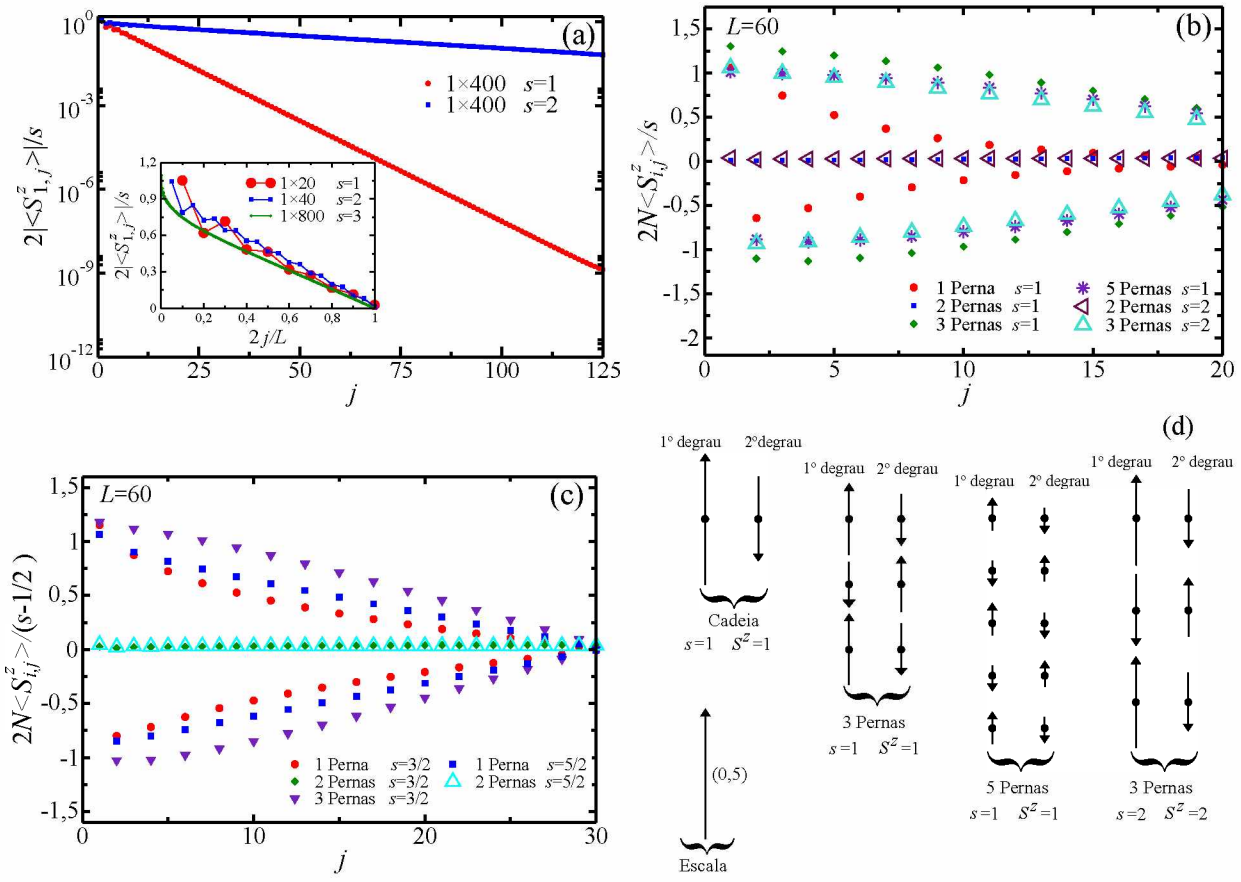


Figura 2.5: (a) Gráfico na escala log-linear de $2\left|\langle S^z_{1,j}\rangle\right|/s$ para cadeias com $L = 400$ e spin $s = 1$ e 2. O gráfico inserido no gráfico principal mostra nossos resultados na escala linear-linear de $2\left|\langle S^z_{1,j}\rangle\right|/s$ para três valores de s. (b) $2N\left|\langle S^z_{1,j}\rangle\right|/s$ em função de j para algumas escadas de tamanho $L = 60$ com spins 1 e 2 (veja a legenda). (c) $2N\left|\langle S^z_{1,j}\rangle\right|/\left(s-\frac{1}{2}\right)$ em função de j para escadas com spins $\frac{3}{2}$ e $\frac{5}{2}$. (d) Valores de $\langle S^z_{1,j}\rangle$ medidos nos dois primeiros degraus de escadas com spins inteiros. O tamanho das setas indica a magnitude de $\langle S^z_{1,j}\rangle$. A escala usada é também apresentada.

Podemos usar um argumento heurístico para entender o fato dos estados de borda aparecerem *somente* em escadas com um número ímpar de pernas. Considere o limite de forte acoplamento, isto é, o acoplamento ao longo dos degraus é muito maior que o acoplamento ao longo das cadeias. Neste limite, o estado fundamental do degrau é um singleto ($s-$pleto) se o número de pernas é par (ímpar). Desse modo os sítios do degrau comportam-se com um spin-s efetivo se N é ímpar. Por esta razão, devemos esperar que $S_{\text{borda}} = 0$ se N é par e $S_{\text{borda}} = \frac{s}{2}$ $\left[S_{\text{borda}} = \frac{1}{2}\left(s-\frac{1}{2}\right)\right]$ para spins inteiros [semi-inteiros] se N é ímpar. De fato, os resultados apresentados nas figuras 2.5(a)-2.5(c) estão em acordo com este cenário [veja também as figuras 2.7(b) e 2.7(c)].

Finalmente, a seguir apresentaremos nossos resultados do gap de spin. Nas figuras 2.6(a)-

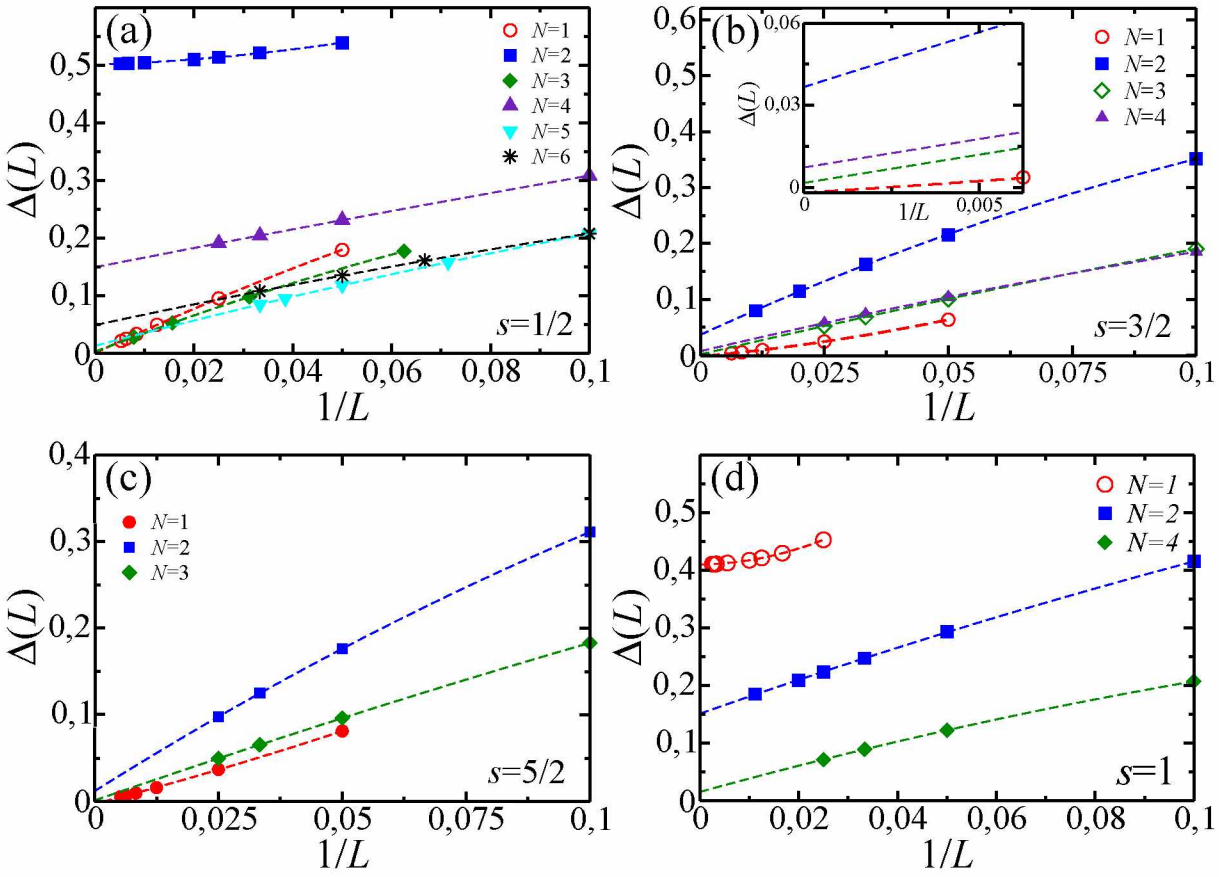


Figura 2.6: Os gráficos (a), (b), (c) e (d) mostram o gap de tamanho finito $\Delta(L)$ como função de $\frac{1}{L}$ para as escadas de Heisenberg de N pernas e spin-s com spins $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ e 1, respectivamente. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas tracejadas nessas figuras conectam os pontos ajustados (veja o texto). O gráfico inserido no gráfico principal na figura (b) é uma ampliação da região próxima de zero.

2.6(d), apresentamos o gap de spin de tamanho finito $\Delta(L)$ em função de $\frac{1}{L}$ para escadas com $s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ e 1 e alguns valores de N. A fim de estimar o gap de spin no limite termodinâmico (Δ_s) assumimos que $\Delta(L)$ tem o seguinte comportamento:

$$\Delta(L) = \Delta_s + \frac{A}{L} + \frac{B}{L^2}. \tag{2.5}$$

É esperado que o gap de spin de cadeias abertas com spins inteiros se comporte como $\Delta(L) = \Delta_s + \frac{B}{L^2}$ [144]. De fato, existem na literatura estudos da cadeia de spin-1 nos quais mostra que $\Delta(L)$ escala com $\frac{1}{L^2}$ para grandes valores de L [24, 130, 144]. É importante mencionar que também encontramos este comportamento para a cadeia de spin-1 [veja a figura 2.6(d)]. Para a estimativa de Δ_s das escadas de Heisenberg, adicionamos o termo $\frac{1}{L}$ uma vez que nossos resultados mostram que a correção de tamanho finito dominante de $\Delta(L)$ é $\frac{1}{L}$ para pequenos tamanhos de rede. Note que se considerarmos a dispersão

de energia $\Delta(k) = \sqrt{\Delta_m^2 + (vk)^2}$ para um mágnon com vetor de onda k, como apontado por Qin e colaboradores na referência [130], podemos ver que $\Delta \sim \Delta_m + \frac{2\pi^2 v^2}{L^2 \Delta_m}$ somente se $L \gg \Delta_m$.1 Isto sugere que a correção de tamanho finito dominante de $\Delta(L)$ é $\frac{1}{L}$ quando os tamanhos do sistema são menores que o comprimento de correlação. Mesmo que a forma de escala assintótica não seja alcançada, é possível obter estimativas razoáveis de Δ_s usando a equação (2.5), como explicaremos a seguir. É possível ajustar nossos dados usando somente o termo $\frac{1}{L}$ $\left(\frac{1}{L^2}\right)$ a fim de obter um limite inferior (superior) e então indicar uma estimativa para o gap de spin através de uma média desses dois limites, como feito por Schollwöck e Jolicoeur na referência [143]. Observamos que se ajustarmos nossos dados com os dois termos, simultaneamente, conseguimos uma estimativa próxima ao procedimento usado por Schollwöck e Jolicoeur, isto é, uma estimativa entre o limite inferior e o limite superior. Por exemplo, para a cadeia de spin-2 nós obtivemos $\Delta_s = 0,084$ considerando o intervalo $200 < L \leq 400$ [2]. Se considerarmos um intervalo de $20 < L < 120$ para extrair o gap de spin encontraremos $\Delta_s = 0,04$. Isto mostra que se usarmos tamanhos de sistema menores que o comprimento de correlação para determinar Δ_s a estimativa deve ser considerada como um limite inferior do gap de spin. Por fim, devemos mencionar que, em princípio, correções logarítmicas como $\frac{1}{L \ln L}$ são esperadas devido aos operadores marginalmente irrelevantes [146]. Contudo, notamos que se substituirmos o último termo da equação (2.5) pelo termo de correção logarítmica $\frac{1}{L \ln(L)}$, as estimativas obtidas através do ajuste são levemente piores do que aquelas encontradas usando a equação (2.5).

Como mencionamos anteriormente, é esperado que as escadas de Heisenberg de N pernas e spin-s possuam um gap de spin nulo (finito) se sN é semi-inteiro (inteiro). De fato, como podemos observar nas figuras 2.6(a)-2.6(d) nossos resultados são consistentes com a conjectura Haldane-Sénéchal-Sierra. Encontramos para escadas com sN semi-inteiro que os valores extrapolados de Δ_s são $\lesssim 10^{-3}$. Esses últimos resultados indicam fortemente um gap de spin nulo para escadas com sN semi-inteiro. Para uma melhor visualização dos resultados de Δ_s, exibimos na tabela 2.2 os valores extrapolados que obtivemos através do procedimento de ajuste de curva. Nesta tabela, apresentamos também algumas estimativas encontradas na literatura. Como podemos ver, nossos resultados são similares àqueles encontrados na literatura e, dentro de nossa precisão, nossos resultados estão em perfeito acordo com a conjectura Haldane-Sénéchal-Sierra. Note que o gap de spin diminui com o número de pernas e com o valor do spin. Este comportamento é esperado e usando o modelo σ não linear Sierra mostrou que o gap de spin se comporta como $\Delta_s \sim Ns^2 \exp(-sNa)$, sendo a uma constante.

Como discutimos anteriormente, devido à existência de estados de borda esperamos que

[2] É interessante mencionar que $\Delta_s = 0,07 \pm 0,02$ foi encontrado na realização experimental da cadeia de Heisenberg com spin-2 [145].

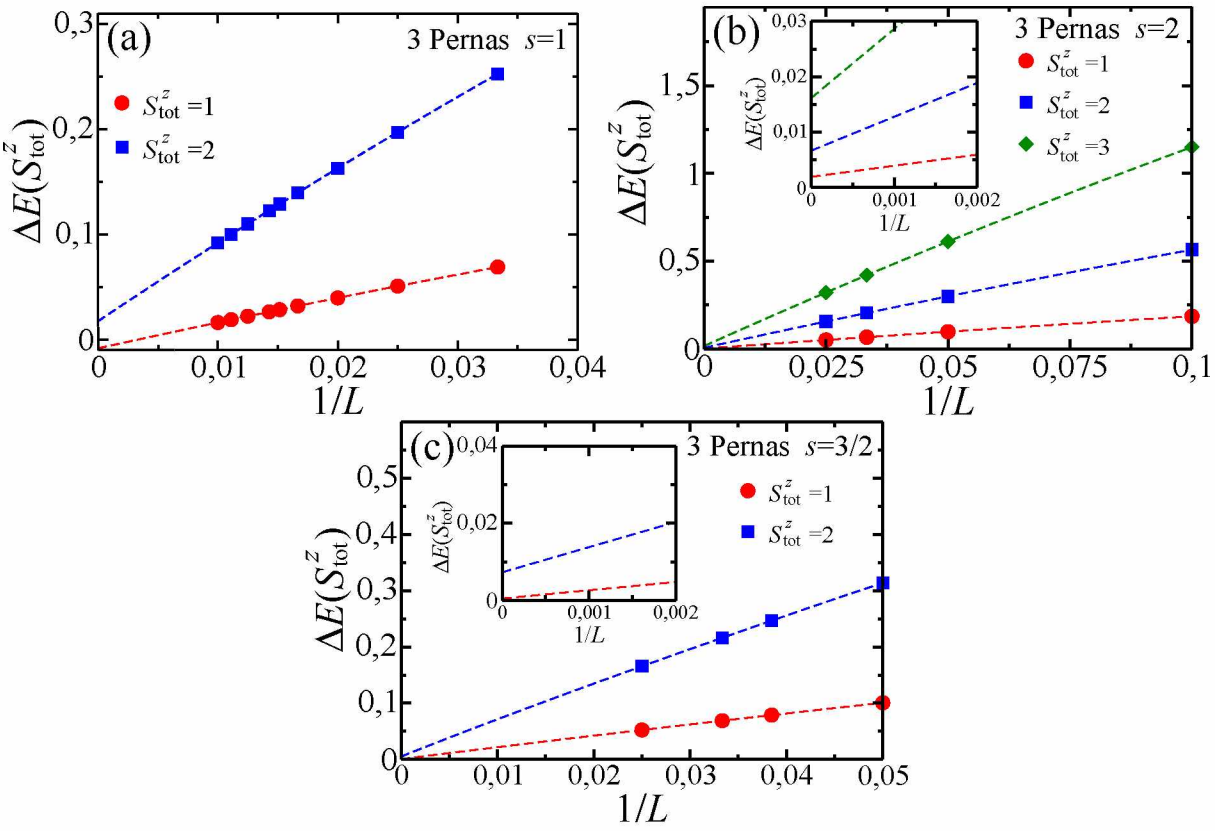


Figura 2.7: Excitação de spin $\Delta E\,(S^z_{\rm tot})$ em função de $\frac{1}{L}$ da escada de Heisenberg de três pernas para alguns valores de $S^z_{\rm tot}$ e spin (a) $s = 1$, (b) $s = 2$ e (c) $s = \frac{3}{2}$. Os símbolos são os dados numéricos e as linhas tracejadas conectam os pontos ajustados (veja o texto). Os gráficos inseridos nos gráficos principais são uma ampliação da região próxima de zero.

Tabela 2.2: Estimativas do gap de spin Δ_s para as escadas de Heisenberg com até seis pernas e $s \leq \frac{5}{2}$. Estes valores foram extraídos a partir do ajuste de nossos dados usando a equação (2.5). Os resultados entre parênteses são algumas das melhores estimativas conhecidas da literatura.

N	$s = \frac{1}{2}$	$s = 1$	$s = \frac{3}{2}$	$s = 2$	$s = \frac{5}{2}$
1	—	0,41025	—	0,084	—
		(0,41050) [135]		(0,085) [143]	
2	0,5011	0,151	0,036	0,013	0,01
	(0,504) [94]				
3	—	0,017	—	0,01	—
4	0,15	0,015	0,007		
	(0,17) [116]				
5	—		—		—
6	0,05				
	(0,05) [116]				

o estado fundamental no limite termodinâmico seja $(s+1)^2\left[\left(s-\frac{1}{2}\right)^2\right]$ vezes degenerado para escadas com spins inteiros (semi-inteiros) e N ímpar. A fim de verificar esta afirmação, calculamos também as excitações de spin $\Delta E\left(S^z_{\text{tot}}\right) = E_0\left(S^z_{\text{tot}}\right) - E_0\left(0\right)$ para alguns valores de S^z_{tot}. Nas figuras 2.7(a)-2.7(c), mostramos a excitação de spin $\Delta E\left(S^z_{\text{tot}}\right)$ para escadas de três pernas com $s = 1, 2$ e $\frac{3}{2}$. Como esperado, os resultados da escada de Heisenberg de três pernas e spin-1 apresentados na figura 2.7(a) indicam que no limite termodinâmico $E_0(1) = E_0(0)$. Para valores grandes de s, como ilustrado nas figuras 2.7(b) e 2.7(c), é difícil ver precisamente se o estado fundamental é degenerado. A principal fonte desta dificuldade está relacionada com os tamanhos de sistema que consideramos. Todavia, nossos resultados dentro da acurácia das extrapolações são consistentes com a degenerescência do estado fundamental mencionada acima. Além disso, se tivéssemos o gap de spin para escadas com spins inteiros considerando somente $\Delta E(1)$, encontraríamos que o gap de spin para $N = 4$ seria maior que $N = 3$, o que não é esperado. Por estas razões, acreditamos que no limite termodinâmico o estado fundamental é degenerado para escadas com N ímpar.

Capítulo 3

Entropia de emaranhamento de escadas quânticas

Emaranhamento é uma propriedade muito peculiar de sistemas compostos que tem intrigado os físicos desde o surgimento da mecânica quântica. Este fenômeno ocorre quando dois ou mais constituintes de um sistema interagem de tal forma que o estado quântico de cada constituinte não pode ser descrito independentemente dos outros, mesmo quando estas partes estejam espacialmente separadas por uma longa distância. Por esta razão, um estado emaranhado não pode ser definido como um produto de estados locais de cada constituinte do sistema. O emaranhamento é um ingrediente fundamental no teletransporte de estados quânticos e é também uma chave importante em áreas como computação quântica e informação quântica [147]. Entre os vários quantificadores de emaranhamento, a entropia de emaranhamento (EE) é um dos mais usados, visto que ela é sensitiva à correlações quânticas de longa distância de sistemas críticos [147, 148].

Neste capítulo, investigaremos o emaranhamento de escadas quânticas. Em particular, vamos propor uma conjectura para o comportamento de escala da EE de escadas quânticas críticas [41]. Antes de apresentar nossos resultados, faremos primeiramente uma breve revisão do comportamento da EE.

Nos últimos anos, um grande esforço teórico tem sido feito para entender o comportamento de escala da EE de sistemas bipartidos. Particularmente, a violação da lei entrópica da área tem sido uma questão vastamente debatida em dias atuais [50, 53, 55, 56, 59–62, 149–154]. A entropia de emaranhamento de dois subsistemas compostos $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ é definida como a entropia de von Neumann $S_{\mathcal{A}} = -\mathrm{Tr}\rho_{\mathcal{A}} \ln \rho_{\mathcal{A}}$, sendo $\rho_{\mathcal{A}}$ a matriz de densidade reduzida. Uma vez que $S_{\mathcal{A}} = S_{\mathcal{B}}$, a informação compartilhada entre os subsistemas $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ acontece apenas entre os graus de liberdade localizados ao redor da superfície que os separa. Devido a este fato, é

esperado que a EE de um hipercubo $\mathcal{A}$ de lado $\mathcal{N}$ se comporte como

$$S_{\mathcal{A}} \sim \mathcal{N}^{d-1}, \tag{3.1}$$

sendo d a dimensão do hipercubo e $\mathcal{N}^{d-1}$ a hipersuperfície ("área") de contorno separando as regiões $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$. De fato, este comportamento de escala é esperado para sistemas que apresentam um gap de energia diferente de zero [155] e também é observado em alguns sistemas críticos (veja por exemplo [53] e suas referências). Em contrapartida, alguns modelos tais como os sistemas críticos unidimensionais [54], sistemas de férmions livres com uma superfície de Fermi finita em qualquer dimensão [55, 56], o modelo de Heisenberg bidimensional [57, 58] e os modelos críticos conformes bidimensionais [156, 157] apresentam um termo de correção logarítmica além de $\mathcal{N}^{d-1}$.

É bem conhecido que o prefator do termo de correção logarítmica de sistemas críticos unidimensionais de tamanho L é universal e está associado com a carga central c pela seguinte equação [54]:

$$S(L,\ell) = \frac{c}{3\eta} \ln \left[\frac{\eta L}{\pi} \text{sen} \left(\frac{\pi \ell}{L} \right) \right] + a, \tag{3.2}$$

sendo que ℓ é o tamanho do subsistema $\mathcal{A}$, a é uma constante não universal e $\eta = 1$ [2] para sistemas com condições de contorno periódicas (CCP) [abertas (CCA)]. Note que outras correções subdominantes existem e estão relacionadas com as dimensões de escala [158, 159].

Para qualquer dimensão d, é esperado o seguinte comportamento geral da EE de um hipercubo $\mathcal{A}$ de lado $\mathcal{N}$ (veja a figura 3.1):

$$S(\ell) = A\mathcal{N}^{d-1} + C\left(\mathcal{N}\right) \ln\left(\mathcal{N}\right) + B. \tag{3.3}$$

Neste capítulo, determinaremos numericamente o prefator do termo logarítmico $C\left(\mathcal{N}\right)$ para algumas *escadas quânticas*. Como veremos a seguir, nossos resultados indicam que este prefator é universal e está associado com a classe de universalidade das cadeias que compõem as escadas em estudo [41]. Particularmente, investigaremos a EE de escadas compostas pelas seguintes cadeias críticas: cadeias de férmions livres, cadeias de Heisenberg e cadeias de Ising quânticas. Como já mencionado anteriormente, as escadas de N pernas são caracterizadas por N cadeias paralelas acopladas entre si tal que o acoplamento ao longo das cadeias é comparável ao acoplamento entre as mesmas [10]. Denotaremos o tamanho das escadas por $N \times L$.

Embora a maior parte dos trabalhos na literatura considere o subsistema $\mathcal{A}$ imerso em um reservatório, como ilustrado na figura 3.1(a), quando se usa o DMRG é conveniente considerar este subsistema no canto das escadas [veja a figura 3.1(b)]. Aqui, nosso principal objetivo é apresentar uma conjectura para o comportamento de escala da entropia de emaranhamento

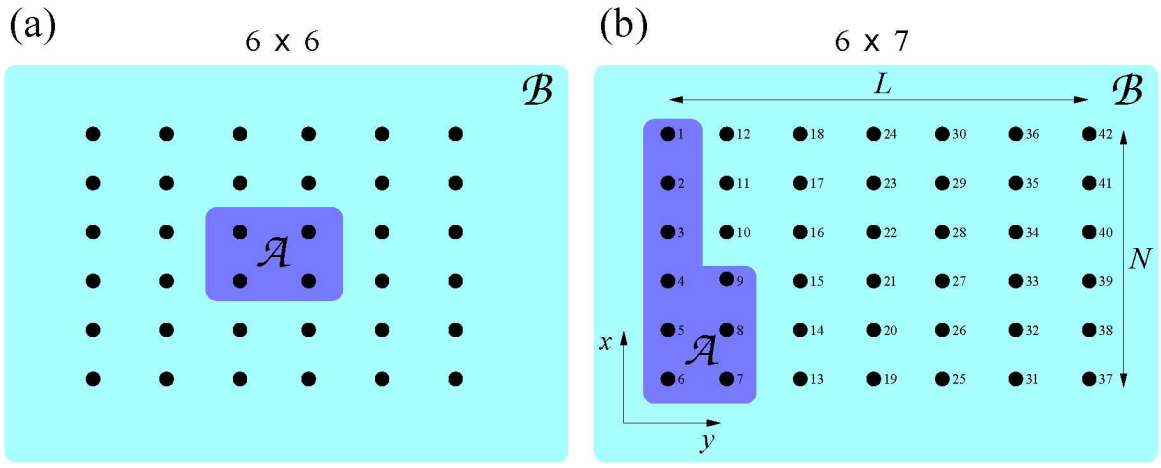


Figura 3.1: Ilustração de uma escada de seis pernas dividida em dois blocos emaranhados. Em (a) o subsistema $\mathcal{A}$ está imerso no meio do sistema e em (b) o subsistema $\mathcal{A}$ está na canto da escada. Indicamos também nesta figura os rótulos dos sítios.

de escadas críticas. Surpreendentemente, verificamos que as correções de tamanho finito da EE de escadas quânticas são muito similares àquelas de cadeias críticas [veja a equação (3.2)].

Considere um sistema com geometria de escada composto por N cadeias quânticas de tamanho L e ℓ sendo o número de sítios do bloco $\mathcal{A}$ rotulado como mostrado na figura 3.1(b). Neste contexto, conjecturamos que o comportamento de escala da EE para escadas críticas é dado por [41]:

$$S(\ell) = AN + \frac{c}{3\eta_x} N_{gl} \ln\left[\frac{\operatorname{sen}\left(\frac{\pi\ell}{NL}\right)}{\operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{L}\right)}\right] + B + \sum_{j=1}^{\left[\frac{N}{2}\right]} a_j \cos\left(\frac{2\pi\ell j}{N}\right), \tag{3.4}$$

sendo que c é a carga central das cadeias quânticas usadas para formar as escadas, N_{gl} é o número de ramos da relação de dispersão associados com excitações de gap nulo para uma dada energia (conforme explicaremos abaixo), A, B e a_j são constantes não universais e $\eta_x = 1(2)$ para escadas com condições de contorno periódicas (abertas) na direção x. O último termo da equação (3.4) é um *ansatz*, o qual se mostrou eficiente para descrever as oscilações da EE. A importância do número de modos de gap nulo tem sido discutida em sistemas de spins [160–162] e sistemas de bósons [163]. A conjectura apresentada acima [equação (3.4)] indica que o prefator da correção logarítmica da entropia de emaranhamento de escadas críticas é universal e está relacionado à classe de universalidade do comportamento crítico das cadeias que são usadas para construir as escadas quânticas. Note que para sistemas com gap finito a lei entrópica da área é satisfeita uma vez que $N_{gl} = 0$. A seguir, apresentaremos nossos resultados da EE para escadas críticas que corroboram com a nossa conjectura.

3.1 Escadas de férmions livres

Primeiramente, consideraremos uma escada de férmions livres, cuja hamiltoniana é dada por:

$$\hat{H} = \sum_{k_x,k_y} \varepsilon\left(k_x,k_y\right) c^{\dagger}_{k_x,k_y} c_{k_x,k_y}, \tag{3.5}$$

sendo $c^{\dagger}_{k_x,k_y}$ $\left(c_{k_x,k_y}\right)$ o operador de criação (aniquilação) de um férmion com momentos k_x e k_y e $\varepsilon\left(k_x,k_y\right) = -2\left[\cos\left(k_x\right) + \cos\left(k_y\right)\right]$ a relação de dispersão do sistema. Na equação (3.5), a soma é feita sobre os números de onda na primeira zona de Brillouin. Os momentos são dados por $k_x = \frac{2\pi j_x}{L}$ $\left[\frac{\pi j_x}{L+1}\right]$ e $k_y = \frac{2\pi j_y}{N}$ $\left[\frac{\pi j_y}{N+1}\right]$ para condições de contorno periódicas (abertas) nas direções x e y, respectivamente. As variáveis j_x e j_y são números inteiros e seus valores dependem das condições de contorno e dos valores de L e N, respectivamente.

No caso de sistemas de férmions livres é possível determinar a entropia de emaranhamento para sistemas grandes usando o método da matriz de correlação [164] (veja o apêndice C). Note que em princípio é possível usar a conjectura de Widom[1] [60] para determinar o prefator que aparece na correção logarítmica (veja por exemplo a referência [153]). Entretanto, observamos que é mais fácil entender este prefator em termos do número de modos de gap nulo N_{gl} que cruzam o nível de Fermi. Para um maior esclarecimento, mostramos na figura 3.2 a relação de dispersão da escada de férmions livres de quatro pernas para diferentes condições de contorno. Nesta figura, apontamos os valores de N_{gl} associados a algumas densidades ρ para cada configuração de condições de contorno. Para o caso de preenchimento meio $\left(\rho = \frac{1}{2}\right)$ com condições de contorno periódicas na direção x e condições de contorno abertas na direção y, o número de modos de gap nulo que cruzam o nível de Fermi é igual ao número de pernas, isto é $N_{gl} = N$. Para o caso das outras condições de contorno $N_{gl} \approx N$ para valores grandes de N. Dessa forma, baseado em nossa conjectura, esperamos que a EE para valores grandes de N e L se comporte como:

$$S\left(\ell = \frac{NL}{2}\right) = AN + \frac{N}{6}\ln\left(\frac{L}{\pi}\right) + B. \tag{3.6}$$

A equação (3.6) sugere que a lei entrópica da área é quebrada para o caso de $\rho = \frac{1}{2}$. De fato, isto foi observado em sistemas de férmions livres em duas dimensões [55, 59, 60, 152, 165].

Na figura 3.3(a), apresentamos $S(\ell)$ em função de ℓ para um tamanho de *cluster* 4×750 com CCP (CCA) na direção x (y) e três valores de densidade. Como podemos observar, os dados obtidos pelo método da matriz de correlação estão em perfeito acordo com a con-

[1] A conjectura de Widom diz que $S \sim \frac{L^{D-1}\log(L)}{(2\pi)^{D-1}} \frac{1}{12} \int_{\partial\Omega}\int_{\partial\Gamma} |n_x \cdot n_p| dS_x dS_y$, sendo D a dimensão do sistema, $\partial\Omega$ e $\partial\Gamma$ as fronteiras da superfície de Fermi e n_x e n_p são vetores unitários normais a estas fronteiras. Para mais detalhes veja a referência [60].

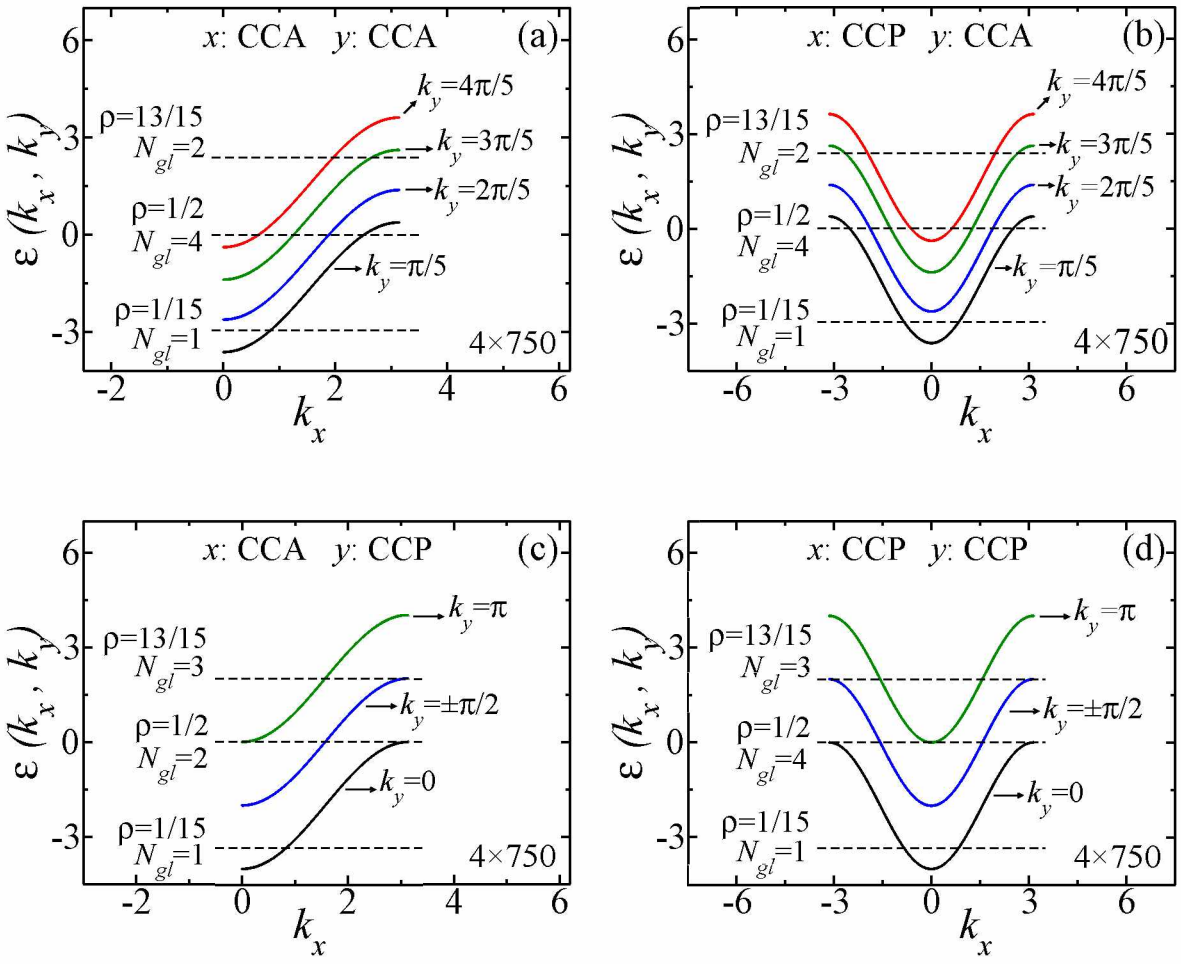


Figura 3.2: A relação de dispersão da escada de férmions livres de quatro pernas com tamanho 4×750 para diferentes condições de contorno. As linhas tracejadas horizontais indicam a posição dos níveis de Fermi para três valores de densidade ρ. Indicamos também os valores de N_{gl} associados com cada densidade. Note que alguns ramos são degenerados.

jectura proposta [equação (3.4)]. No procedimento de ajuste dos dados usamos $c = 1$ (que corresponde à carga central da cadeia de férmions livres) e os valores de N_{gl} usados foram obtidos contando o número de modos de gap nulo que cruzam o nível de Fermi, como ilustrado na figura 3.2. Concordâncias similares são encontradas para diversos valores de N, como mostrado na figura 3.3(b).

A fim de entender a contribuição do primeiro termo da equação (3.4), apresentamos na figura 3.3(c) a entropia de emaranhamento para os *clusters* 20×60 e 40×120 com CCP (CCA) na direção x (y) e densidade $\rho = \frac{1}{2}$. Como podemos notar, $S(\ell)$ cresce linearmente para $\ell \leq N$ e a escala logarítmica está presente somente para $\ell \geq N$ [veja o gráfico inserido no gráfico principal da figura 3.3(c)]. Se impusermos um *ansatz* para $S(\ell)$ similar ao da equação (3.2) e usarmos o fato de que $S(\ell)$ é contínua em $\ell = N$ $\left(\text{i. e. } AN + B = \frac{c}{3\eta_x} N_{gl} \ln\left[\frac{NL}{\pi} \text{sen}\left(\frac{\pi}{L}\right)\right]\right)$

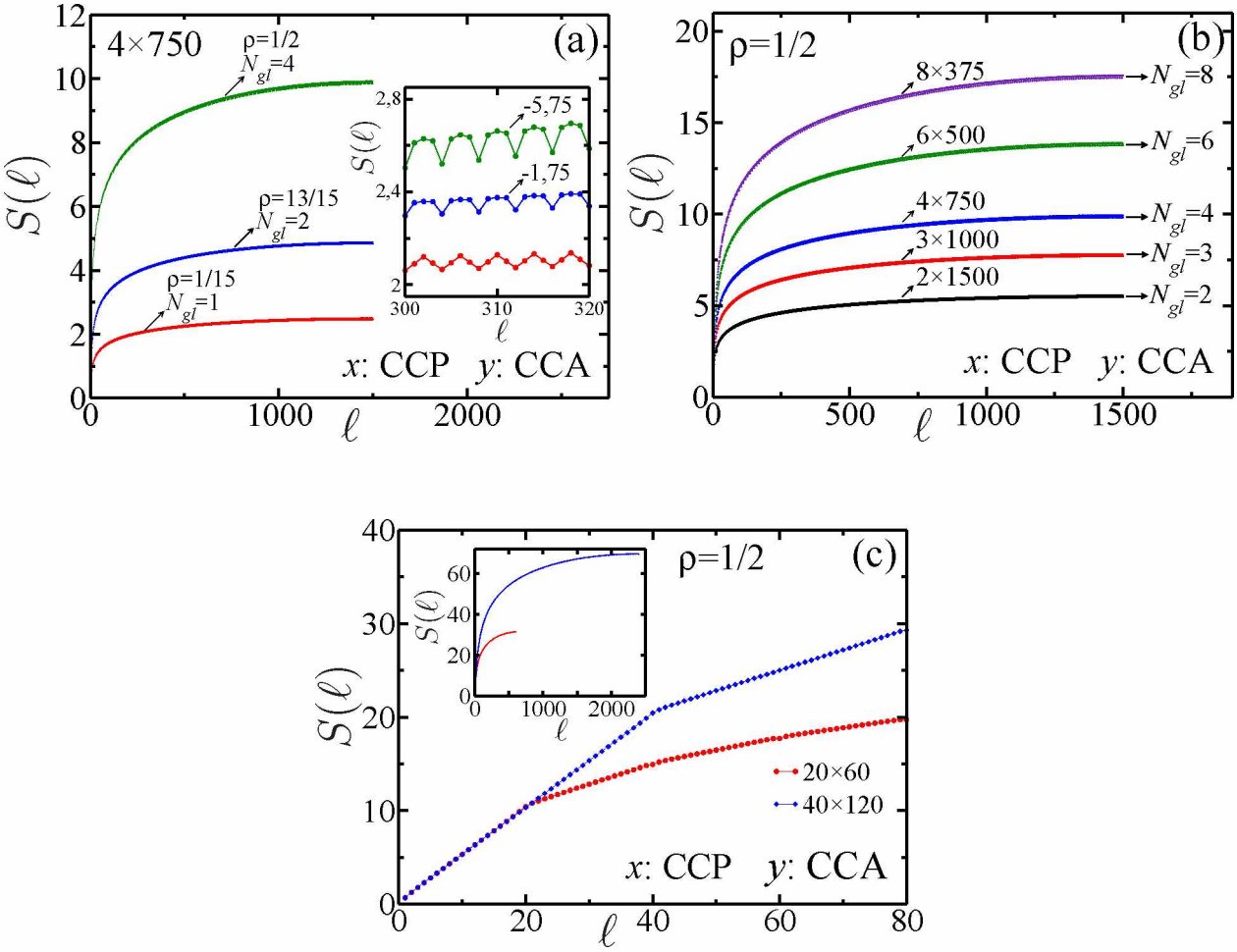


Figura 3.3: $S(\ell)$ em função de ℓ para as escadas de férmions livres. (a) Resultados para um *cluster* 4×750 e três valores de densidade. O gráfico inserido no gráfico principal mostra $S(\ell)$ para poucos sítios. A fim de apresentar todos os dados na mesma figura, adicionamos algumas constantes aos valores de S. (b) Dados da EE para diversos valores de N e preenchimento meio. Através do ajuste dos dados, obtivemos $A = 0,56$ e $B = 0,37$. As constantes a_j são pequenas e variam de -0,04 até -0,01. (c) Resultados para escadas de vinte e quarenta pernas no caso de $\rho = \frac{1}{2}$. Os símbolos em (a) e (b) são os dados obtidos pelo método da matriz de correlação (veja o texto) e as linhas sólidas conectam os pontos ajustados usando nossa conjectura [equação (3.4)].

podemos perceber que a EE deve se comportar como a equação (3.4). Isto é muito interessante, uma vez que podemos obter o prefator A estudando o comportamento de $S(\ell)$ para $\ell < N$, o qual é mais fácil de ser obtido.

3.2 Escadas de Heisenberg

Agora, vamos considerar as escadas de Heisenberg de N-pernas e spin-s (definidas no capítulo 2). Como mencionado anteriormente, é bem conhecido que as escadas de Heisenberg de N pernas e spin-s possuem um gap de spin finito (nulo) se sN é inteiro (semi-inteiro) [10, 107, 109, 110] (veja também [40] e suas referências). Uma vez que estamos interessados em escadas críticas, focaremos em escadas de Heisenberg com valores de sN semi-inteiros. Para o caso dessas escadas, obtivemos a EE numericamente usando o DMRG [24]. Por simplicidade, consideramos somente condições de contorno abertas nas direções x e y. As cadeias de Heisenberg com spins semi-inteiros tem carga central $c = 1$ [114, 134, 136, 146, 166]. Além disso, baseado em aproximação de onda de spin é esperado que a dispersão do modelo de Heisenberg bidimensional tenha um modo de Goldstone $E(k) \sim \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. Uma vez que o número de pernas é finito, os valores de k_y são discretos. Devido a este fato, análogo ao caso de férmions livres, há somente um ramo da relação de dispersão ($E(k_x, 0) \sim |k_x|$) com excitações de gap nulo, isto é $N_{gl} = 1$.

Na figura 3.4(a), mostramos $S(\ell)$ em função de ℓ para as escadas de Heisenberg com spins $s = \frac{1}{2}$ e $s = \frac{3}{2}$. Similar ao caso das escadas de férmions livres, a equação (3.4) reproduz muito bem o comportamento de escala de $S(\ell)$ se usarmos $c = 1$ e $N_{gl} = 1$. Note que neste caso nossos resultados sugerem que uma violação da lei entrópica da área não é esperada para o caso bidimensional. A entropia de emaranhamento para valores grandes de N e L deve comportar-se como $S\left(\ell = \frac{NL}{2}\right) = AN + \frac{1}{6}\ln\left(\frac{L}{\pi}\right) + B$. A fim de verificar isto, apresentamos na figura 3.4(b) $S\left(\ell = \frac{NL}{2}\right) - AN - B$ em função de $-\frac{1}{6}\ln\left[\text{sen}\left(\frac{\pi}{L}\right)\right]$. Como podemos ver, nossos resultados indicam fortemente que o prefator do termo logarítmico é $\frac{1}{6}$ para as escadas de Heisenberg quando o subsistema $\mathcal{A}$ está no canto da escada [veja a figura 3.1(b)]. Note que este resultado é intrigante uma vez que o prefator do termo logarítmico seria $\frac{N}{6}$ para o caso de N cadeias desacopladas com condições de contorno abertas. Simulações de Monte Carlo [57] assim como resultados do DMRG [58] mostram um comportamento similar para a escala da EE.

3.3 Escadas de Ising quânticas

Finalmente, vamos considerar as escadas quânticas de Ising de N pernas, cuja hamiltoniana é dada por:

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{L-1}\sigma_{i,j}^{x}\sigma_{i,j+1}^{x} - \sum_{i=1}^{N-1}\sum_{j=1}^{L}\sigma_{i,j}^{x}\sigma_{i+1,j}^{x} - \lambda\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{L}\sigma_{i,j}^{z}, \tag{3.7}$$

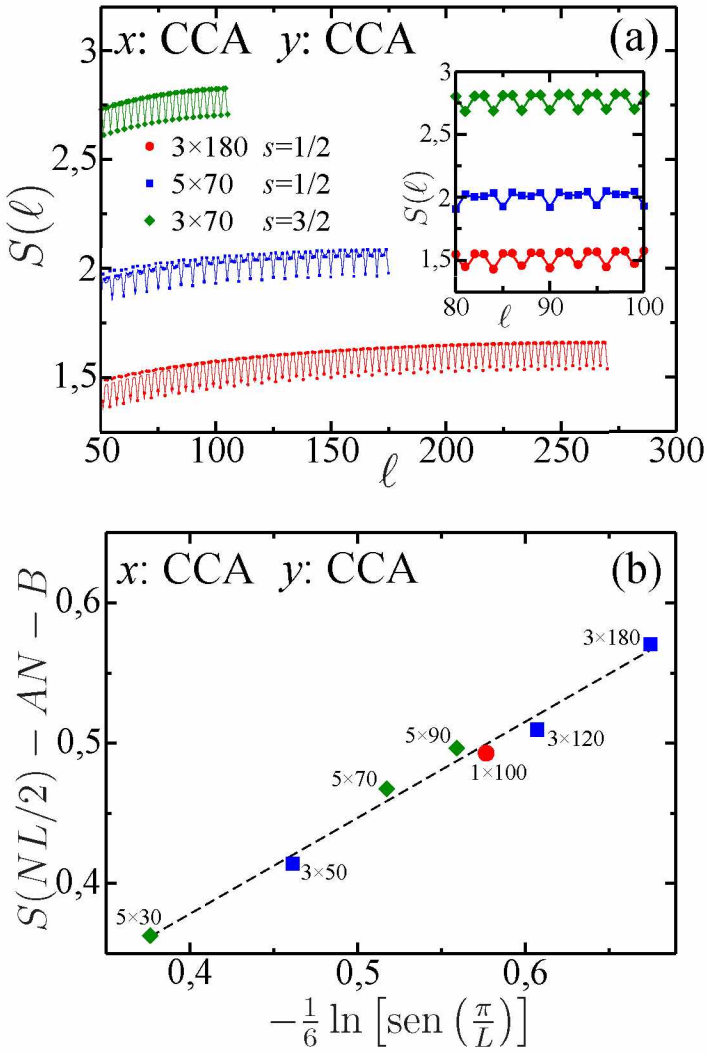


Figura 3.4: (a) $S(\ell)$ para as escadas de Heisenberg com spin $s = \frac{1}{2}$ e $s = \frac{3}{2}$. Os símbolos são dados obtidos usando o grupo de renormalização da matriz de densidade e as linhas sólidas conectam os pontos ajustados usando nossa conjectura [equação (3.4)] com $c = 1$ e $N_{gl} = 1$. A partir dos ajustes, obtivemos $A = 0,27$ e $B = 0,16$ para $s = \frac{1}{2}$. O gráfico inserido no gráfico principal mostra $S(\ell)$ para poucos sítios. (b) $S\left(\ell = \frac{NL}{2}\right) - AN - B$ em função de $-\frac{1}{6}\ln\left[\text{sen}\left(\frac{\pi}{L}\right)\right]$ para diversos tamanhos de *clusters* com spin-$\frac{1}{2}$.

sendo $\sigma^{\alpha}_{i,j}$ (x, y, z) as matrizes de Pauli que atuam na i-ésima perna e no j-ésimo degrau. Essencialmente, este modelo descreve um sistema com interações entre spins mais próximos ao longo do eixo x na presença do campo magnético na direção z. Note que a existência do campo magnético faz com que haja um competição de direção preferencial para o alinhamento dos spins da rede. Podemos observar que no limite de $\lambda \to 0$ $(\lambda \to \infty)$ os spins tendem a se alinhar paralelamente ao longo do eixo x (z). Por esta razão, podemos concluir que há um valor de λ no qual existe uma transição de fase no sistema. É bem conhecido que no modelo quântico de Ising unidimensional, à temperatura nula, esta transição de fase ocorre

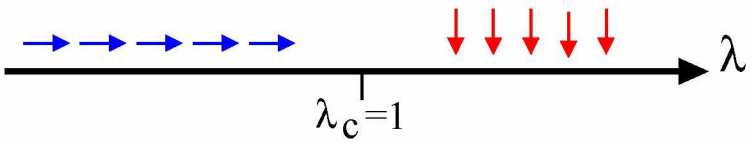


Figura 3.5: Ilustração do diagrama de fases do modelo quântico de Ising unidimensional à temperatura nula. A transição de fase ocorre no ponto crítico $\lambda_c = 1$ de um estado em que os spins estão alinhados paralelamente ao longo do eixo z para um estado de spins alinhados paralelamente ao longo do eixo x.

no ponto crítico $\lambda_c = 1$ (veja a figura 3.5). Além disso, o comportamento crítico da cadeia quântica de Ising é descrito pela teoria de campos conforme com carga central $c = \frac{1}{2}$ [167]. Neste contexto, para investigar o comportamento de escala da EE das escadas quânticas de Ising críticas devemos determinar os valores críticos $\lambda_c(N)$ para cada valor de N. Assim, primeiramente, obtivemos estimativas de tamanho finito de $\lambda_c(N, L)$ usando a entropia de emaranhamento, como relatado na referência [168].

Apresentamos na figura 3.6(a) $\lambda_c(N, L)$ em função de $\frac{1}{L}$ para escadas de duas e três pernas. Para determinar $\lambda_c(N) = \lim_{L\to\infty} \lambda_c(N, L)$ assumimos que $\lambda_c(N, L)$ se comporta como $\lambda_c(N, L) = \lambda_c(N) + \frac{a}{L} + \frac{b}{L^2}$. Ajustando nossos dados, obtivemos $\lambda_c(N) = 1,838$, 2,219, 2,243, 2,578 e 2,670 para $N = 2$, 3, 4, 5 e 6, respectivamente. É interessante notar que extrapolando estas estimativas para obter $\lambda_c(\infty)$, como apresentado no gráfico inserido no gráfico principal da figura 3.6(a), obtivemos $\lambda_c^{2D} = \lambda_c(\infty) = 3,1$. Esta estimativa λ_c^{2D} é muito próxima das estimativas do ponto crítico do modelo de Ising quântico bidimensional obtidas por Monte Carlo [169] $\left(\lambda_c^{2D} = 3,044\right)$ e pelo *ansatz* de renormalização de emaranhamento de multiescala [170] $\left(\lambda_c^{2D} = 3,07\right)$. A pequena discrepância entre nossa estimativa e as estimativas encontradas na literatura está provavelmente associada com os pequenos tamanhos de rede considerados para extrapolar nossos dados.

Assim como no modelo de Heisenberg, é esperado que as escadas de Ising tenham somente um modo de gap nulo ($N_{gl} = 1$) e nossos resultados sugerem que a violação da lei entrópica da área não deve ocorrer para o modelo de Ising quântico bidimensional. No ponto crítico, a entropia deve se comportar como $S\left(\ell = \frac{NL}{2}\right) = AN + \frac{1}{12}\ln\left(\frac{L}{\pi}\right) + B$ para condições de contorno abertas nas duas direções. Na figura 3.6(b), apresentamos a entropia de emaranhamento $S(\ell)$ das escadas de Ising no ponto crítico para $N = 2, 3$ e $N = 4$. Como mostrado nesta figura, a conjectura proposta [veja a equação (3.4)] também reproduz muito bem o comportamento de escala da EE das escadas de Ising críticas.

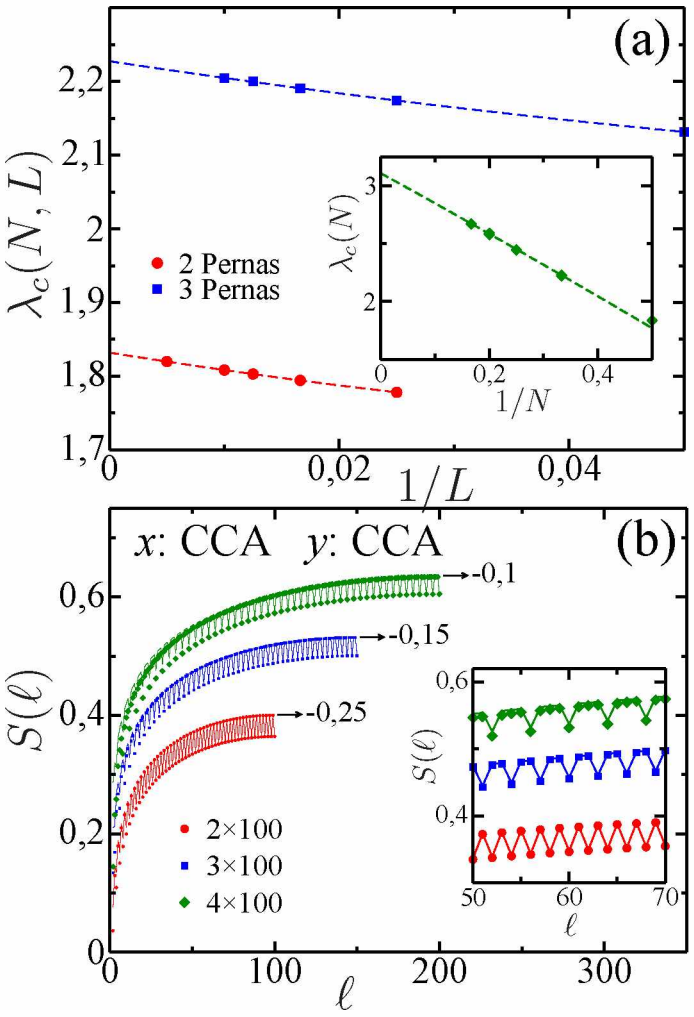


Figura 3.6: (a) Estimativas de tamanho finito do ponto crítico $\lambda_c(N, L)$ em função de $\frac{1}{L}$ para escadas de Ising com duas e três pernas. O gráfico inserido no gráfico principal mostra $\lambda_c(N)$ em função de $\frac{1}{N}$. (b) $S(\ell)$ versus ℓ para três valores de N nos pontos críticos. Os símbolos são nossos resultados obtidos usando o DMRG e as linhas sólidas conectam os pontos ajustados pela equação 3.4 com $c = \frac{1}{2}$ e $N_{gl} = 1$. A fim de apresentar todos os dados nesta figura adicionamos algumas constantes nos valores de S. O gráfico inserido no gráfico principal mostra $S(\ell)$ para poucos sítios.

Capítulo 4

Correlações dinâmicas em sistemas quânticos unidimensionais

Mesmo em dias atuais, tem sido um desafio estudar propriedades de sistemas fortemente correlacionados que dependem do tempo. Em consequência disso, um grande esforço teórico tem sido feito na tentativa de superar a dificuldade de determinar funções de correlação dinâmica, mais especificamente o fator de estrutura dinâmico. Nas duas últimas décadas, novos métodos foram desenvolvidos para que o cálculo de propriedades dinâmicas de sistemas fortemente correlacionados se torne mais acessível. Estes métodos incluem o grupo de renormalização da matriz de densidade dependente do tempo [32, 33, 79, 82] (discutido no capítulo 1), cálculos de fatores de forma usando o *ansatz* de Bethe [171, 172] e novas aproximações da teoria de campos que vão além do modelo de líquido Luttinger (LL) [76, 77]. Com o método de Monte Carlo é possível investigar propriedades dinâmicas, mas a aplicabilidade deste método é restrita a poucos sistemas devido ao bem conhecido problema do sinal. É conhecido que certas funções de respostas dinâmicas são qualitativamente diferentes das previsões feitas a partir do modelo de líquido Luttinger [173]. Neste sentido, novas aproximações, coletivamente conhecidas como teoria de líquido de Luttinger não linear (nLL), têm surgido na tentativa de lidar com este problema. Na seção 4.2 discutiremos mais detalhadamente sobre previsões baseadas em teoria de campos.

Motivados pelo avanço teórico no cálculo de propriedades dinâmicas, usando o tDMRG, apresentaremos neste capítulo resultados de correlações temporais para sistemas quânticos unidimensionais. Particularmente, apresentaremos um estudo do comportamento da autocorrelação dinâmica do *bulk* e da borda de cadeias quânticas. Para tanto, consideraremos como modelos de estudo o modelo de Heisenberg XXZ com spin-$\frac{1}{2}$ e o modelo de Heisenberg com anisotropia de íon simples de spin-1 e spin-$\frac{3}{2}$. Este trabalho é inspirado por estudos de fenômenos críticos de contorno [174], que tem revelado efeitos notáveis, tais como: condu-

tância de fios quânticos [175–177], blindagem de impurezas magnéticas [178], oscilações de Friedel em densidades de carga e spin [179–181] e oscilações em entropia de emaranhamento [182, 183].

Neste capítulo estudaremos a dependência temporal da autocorrelação de spin de sistemas críticos unidimensionais em tempos longos. As autocorrelações dinâmicas são escritas como:

$$C_j(t) = \langle\psi_0|\hat{\mathcal{O}}_j^{\dagger}(t)\hat{\mathcal{O}}_j(0)|\psi_0\rangle \tag{4.1}$$

sendo que $\hat{\mathcal{O}}_j$ é um operador que atua no sítio j e $|\psi_0\rangle$ é o estado fundamental do sistema de interesse. Em colaboração com R. G. Pereira e I. S. Eliëns, apresentaremos uma previsão, baseada em teoria quântica de campos, para o comportamento da autocorrelação de spin considerando os operadores $\hat{\mathcal{O}}_j = S_j^z$ e $\hat{\mathcal{O}}_j = S_j^-$. Denotaremos como $C_j^{\parallel}(t)$ $\left[C_j^{\perp}(t)\right]$ a componente longitudinal [transversal] da autocorrelação de spin associada ao operador S_j^z $\left[S_j^-\right]$. Note que se estamos interessados na autocorrelação de borda (*bulk*) para sistemas com condições de contorno abertas devemos considerar $j = 1$ $\left(j = \frac{L}{2}\right)$. Conforme já mencionado, um dos modelos que investigaremos é o modelo de Heisenberg XXZ. Para podermos inferir sobre o comportamento das autocorrelações de spin, inicialmente, investigaremos as correlações da cadeia de Heisenberg XX (a qual é um caso particular da cadeia de Heisenberg XXZ). O estudo desta cadeia é útil visto que o modelo que a descreve possui solução analítica relativamente simples via técnica de fermionização. Adiante, observaremos que muitas das características gerais do comportamento das autocorrelações de spin podem ser observadas a partir da análise do modelo de Heisenberg XX unidimensional.

4.1 Cadeia de Heisenberg XX

O modelo de Heisenberg XX unidimensional de spin-$\frac{1}{2}$, com condições de contorno abertas, é definido pela seguinte hamiltoniana:

$$\hat{H} = \frac{J}{4}\sum_{i=1}^{L-1}\left(\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y\sigma_{i+1}^y\right), \tag{4.2}$$

sendo J o acoplamento de troca entre vizinhos mais próximos e $\sigma_i^{x,y}$ as matrizes de Pauli que atuam no sítio i. Definindo os operadores σ^+e σ^- como:

$$\sigma^+ = (\sigma^x + i\sigma^y)$$

e

$$\sigma^- = (\sigma^x - i\sigma^y),$$

podemos reescrever a hamiltoniana (4.2) em termos destes operadores da seguinte forma:

$$\hat{H} = \frac{J}{2}\sum_{i=1}^{L-1}\left(\sigma_i^+\sigma_{i+1}^- + \text{h.c.}\right). \tag{4.3}$$

A fim de diagonalizar a hamiltoniana da cadeia de Heisenberg XX, usaremos a técnica de fermionização. Para tanto, utilizaremos a transformação de Jordan-Wigner [13] dada por:

$$c_m = \prod_{j=1}^{m-1}\left(-\sigma_j^z\right)\sigma_m^-, \tag{4.4}$$

sendo c_m $\left(c_m^\dagger\right)$ o operador fermiônico de aniquilação (criação) de uma partícula no sítio m. Note que os operadores $c_m^\dagger$ e c_m obedecem as seguintes relações de anticomutação:

$$\left\{c_m^\dagger, c_n\right\} = \delta_{m,n} \tag{4.5}$$

e

$$\{c_m, c_n\} = \left\{c_m^\dagger, c_n^\dagger\right\} = 0. \tag{4.6}$$

Utilizando as relações apresentadas acima e a equação (4.4) é fácil mostrar que:

$$c_i^\dagger c_{i+1} = \sigma_i^+\sigma_{i+1}^-. \tag{4.7}$$

Por conseguinte, podemos reescrever a hamiltoniana (4.3) em termos dos operadores fermiônicos, da seguinte forma:

$$\hat{H} = \frac{J}{2}\sum_{i=1}^{L-1}\left(c_i^\dagger c_{i+1} + \text{h.c.}\right). \tag{4.8}$$

É interessante observar a partir da equação (4.8) que, usando a transformação de Jordan-Wigner, a hamiltoniana da cadeia de Heisenberg XX de spin-$\frac{1}{2}$ é reduzida à hamiltoniana do modelo de férmions não interagentes sem spin.

Os operadores $c_i^\dagger$ e c_i podem ser escritos no espaço de momento em termos dos operadores fermiônicos de criação, $a_k^\dagger$, e aniquilação, a_k, da seguinte forma:

$$c_j = \sqrt{\frac{2}{L+1}}\sum_k \text{sen}\,(kj)\,a_k, \tag{4.9}$$

$$c_j^\dagger = \sqrt{\frac{2}{L+1}}\sum_k \text{sen}\,(kj)\,a_k^\dagger. \tag{4.10}$$

Os valores permitidos de momento k para o sistema com condições de contorno abertas são dados por:

$$k = \frac{\pi}{L+1}, \frac{2\pi}{L+1}, \ldots, \frac{L\pi}{L+1}. \tag{4.11}$$

A fim de escrever a hamiltoniana (4.8) no espaço de momento, usaremos as equações (4.9) e (4.10) de modo que:

$$\hat{H} = J\sum_{k}\cos(k)\, a_k^{\dagger}a_k = \sum_{k}\varepsilon(k)n_k, \tag{4.12}$$

sendo $\varepsilon(k) = J\cos(k)$ a relação de dispersão do modelo e $n_k = a_k^{\dagger}a_k$ o operador que conta o número de partículas do sistema com momento k. Podemos observar que a energia do estado fundamental (menor energia) do modelo de férmions livres ocorre quando todos os N_F níveis de menor energia são preenchidos, sendo N_F o número de partículas associado a este estado. Além disso, note que o valor esperado de n_k no estado fundamental tem somente dois valores possíveis (0 e 1) devido ao princípio de exclusão de Pauli. Denotaremos como k_F o momento associado ao último nível preenchido do estado fundamental, de modo que este estado e sua respectiva energia são dados por:

$$|\psi_0\rangle = \prod_{k\leq k_F} a_k^{\dagger}|0\rangle \tag{4.13}$$

e

$$E_0 = \sum_{k\leq k_F}\varepsilon(k), \tag{4.14}$$

sendo $|0\rangle$ o estado associado ao vácuo.

Uma vez que diagonalizamos a hamiltoniana da cadeia de Heisenberg XX, mostraremos a seguir a componente longitudinal (a qual está associada com a componente z do operador de spin) das correlações estáticas e da autocorrelação dinâmica.

Correlações longitudinais estáticas da cadeia de Heisenberg XX

Definiremos $C_{jl}^{\parallel} = \langle\psi_0|S_j^z S_l^z|\psi_0\rangle$ como a componente longitudinal das correlações estáticas. Sabendo que o operador de spin-$\frac{1}{2}$ S_i^z pode ser escrito como $S_i^z = \frac{1}{2}\left(\sigma_i^+\sigma_i^- + \sigma_i^-\sigma_i^+\right)$ e usando as equações [(4.5) - (4.7)], temos que:

$$S_i^z = n_i - \frac{1}{2}, \tag{4.15}$$

sendo $n_i = c_i^{\dagger}c_i$ o operador que conta o número de partículas do sistema no sítio i. Dessa forma, podemos escrever $C_{jl}^{\parallel}$ da seguinte forma:

$$C_{jl}^{\parallel} = \frac{1}{4} + \langle\psi_0|n_j n_l|\psi_0\rangle - \frac{1}{2}\langle\psi_0|n_j|\psi_0\rangle - \frac{1}{2}\langle\psi_0|n_l|\psi_0\rangle. \tag{4.16}$$

A fim de determinar $C_{jl}^{\parallel}$ em termos de j, l e k_F, primeiramente vamos calcular o termo $A = \langle\psi_0|n_j|\psi_0\rangle$. Usando as equações (4.9) e (4.10), o termo A pode escrito como:

$$A = \frac{2}{L+1} \sum_{k,k'} \text{sen}\,(kj)\,\text{sen}\,(k'j)\,\langle\psi_0|a_k^\dagger a_{k'}|\psi_0\rangle. \tag{4.17}$$

Algumas observações podem ser feitas em relação ao termo $\langle\psi_0|a_k^\dagger a_{k'}|\psi_0\rangle$. Primeiramente, é fácil ver que este termo é nulo para qualquer momento k' diferente de k. Além disso, o estado fundamental $|\psi_0\rangle$ tem seus níveis de energia preenchidos para valores de momento k dentro do intervalo $k \leq k_F$ [veja a equação (4.13)]. Desse modo, podemos concluir que

$$\langle\psi_0|a_k^\dagger a_{k'}|\psi_0\rangle = \begin{cases} 1 & k = k' \text{ e } k \leq k_F \\ 0 & k = k' \text{ e } k > k_F \\ 0 & k \neq k' \end{cases} \tag{4.18}$$

Por esta razão, a equação (4.17) é reduzida para a seguinte forma:

$$A = \frac{2}{L+1} \sum_{k \leq k_F} \text{sen}^2\,(kj)\,. \tag{4.19}$$

O espaçamento entre momentos adjacentes no modelo de Heisenberg XX de spin-$\frac{1}{2}$ com condições de contorno abertas é $\Delta k = \frac{\pi}{L+1}$. No limite de grandes valores de L ($\Delta k \to 0$), o somatório da equação (4.19) pode ser aproximado por uma integral, tal que

$$A = \frac{2}{\pi} \int_0^{k_F} \text{sen}^2\,(kj)\,dk. \tag{4.20}$$

Desse modo, é fácil mostrar que:

$$A = \langle\psi_0|n_j|\psi_0\rangle = \frac{k_F}{\pi} - \frac{1}{\pi}\frac{\text{sen}\,(2k_F j)}{2j}. \tag{4.21}$$

Por fim, para determinarmos a componente longitudinal da correlação estática devemos calcular, ainda, o termo $\langle\psi_0|n_j n_l|\psi_0\rangle$. Usando o teorema de Wick (veja por exemplo a referência [184]), podemos escrever este termo como:

$$\langle\psi_0|n_j n_l|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|n_j|\psi_0\rangle\langle\psi_0|n_l|\psi_0\rangle - \langle\psi_0|c_j^\dagger c_l|\psi_0\rangle\langle\psi_0|c_l^\dagger c_j|\psi_0\rangle. \tag{4.22}$$

Uma vez que já consideramos anteriormente o termo $\langle\psi_0|n_j|\psi_0\rangle$, o nosso problema de calcular o termo $\langle\psi_0|n_j n_l|\psi_0\rangle$ se restringe ao cálculo de $B = \langle\psi_0|c_j^\dagger c_l|\psi_0\rangle$. O cálculo de B é análogo ao caso do termo A mostrado anteriormente, portanto apresentaremos somente seu resultado final. Assim, o termo B é dado por:

$$B = \langle\psi_0|c_j^\dagger c_l|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|c_j c_l^\dagger|\psi_0\rangle = \frac{1}{\pi}\frac{\text{sen}\,(k_F|j-l|)}{|j-l|} - \frac{1}{\pi}\frac{\text{sen}\,(k_F|j+l|)}{|j+l|}. \tag{4.23}$$

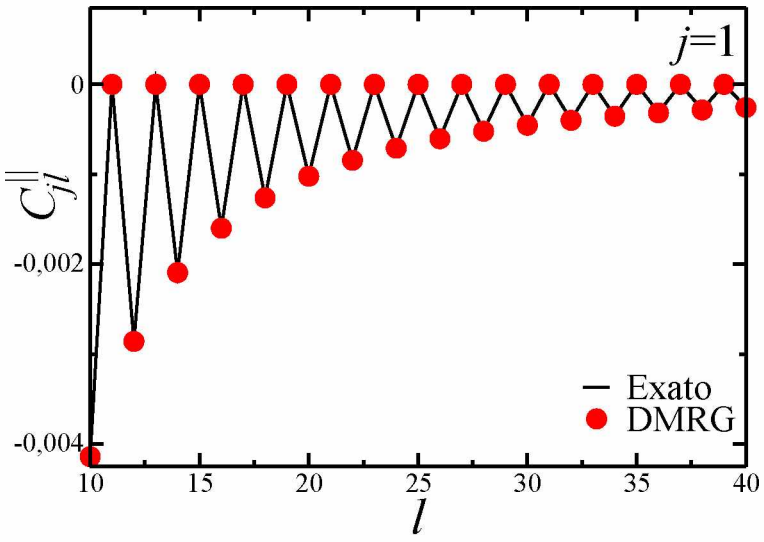


Figura 4.1: Componente longitudinal da correlação estática $\left(C_{jl}^{\parallel}\right)$ de uma cadeia de férmions livres em função de l para $L = 300$, $j = 1$ e $\rho = 1/2$. Os símbolos nesta figura são os resultados obtidos numericamente usando o DMRG e a linha sólida conecta os pontos determinados analiticamente através da equação (4.25).

Usando as equações [(4.21)-(4.23)], a função de correlação $C_j^{\parallel}$ pode ser determinada em termos de j, l e k_F, de acordo com a seguinte equação:

$$C_{jl}^{\parallel} = \frac{1}{4} + \frac{1}{\pi^2}\left[k_F - \frac{\text{sen}\,(2k_F j)}{2j}\right]\left[k_F - \frac{\text{sen}\,(2k_F l)}{2l}\right] - \frac{1}{\pi^2}\left[\frac{\text{sen}\,(|j-l|)}{|j-l|} - \frac{\text{sen}\,(|j+l|)}{|j+l|}\right]^2 - \\ - \frac{1}{2\pi}\left[k_F - \frac{\text{sen}\,(2k_F j)}{2j}\right] - \frac{1}{2\pi}\left[k_F - \frac{\text{sen}\,(2k_F l)}{2l}\right]. \tag{4.24}$$

No caso particular de preenchimento meio ($\rho = 1/2$), isto é, um sistema com $L/2$ partículas, o momento de Fermi é $k_F = \pi/2$. Assim, para $\rho = 1/2$, a equação (4.24) pode ser reduzida para

$$C_{jl}^{\parallel} = -\frac{1}{\pi^2}\left[\frac{\text{sen}\,(|j-l|)}{|j-l|} - \frac{\text{sen}\,(|j+l|)}{|j+l|}\right]^2. \tag{4.25}$$

Finalmente, para ilustrar o comportamento de $C_{jl}^{\parallel}$, mostramos na figura 4.1 o caso particular de $C_{jl}^{\parallel}$ para preenchimento meio e $j = 1$ calculado usando a equação (4.25) e também usando o DMRG. Note que os resultados analítico e numérico estão em perfeito acordo.

Autocorrelações longitudinais dinâmicas da cadeia de Heisenberg XX

Definiremos $C_j^{\parallel}(t) = \langle\psi_0|S_j^z(t)S_j^z(0)|\psi_0\rangle$ como a componente longitudinal da autocorrelação dinâmica do sítio j. Desse modo, analogamente ao caso estático, podemos escrever $C_j^{\parallel}(t)$ em

termos do operador n_j da seguinte forma:

$$C_j^{\parallel}(t) = \frac{1}{4} + \langle\psi_0|n_j(t)n_j(0)|\psi_0\rangle - \frac{1}{2}\langle\psi_0|n_j(0)|\psi_0\rangle - \frac{1}{2}\langle\psi_0|n_j(t)|\psi_0\rangle. \tag{4.26}$$

Lembrando que na representação de Heisenberg a evolução temporal de um dado operador $\hat{\mathcal{O}}$ é dada por $\hat{\mathcal{O}}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\mathcal{O}}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$, podemos escrever o operador $n_j(t)$ como $n_j(t) = c_j^{\dagger}(t)c_j(t)$. Sem perda de generalidade, usaremos $\hbar = 1$. No caso de preenchimento meio ($\rho = 1/2$), temos que:

$$\langle\psi_0|n_j(t)|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|n_j(0)|\psi_0\rangle = \frac{1}{2}. \tag{4.27}$$

Assim, a autocorrelação $C_j^{\parallel}(t)$ em $\rho = \frac{1}{2}$ é dada por

$$C_j^{\parallel}(t) = \langle\psi_0|c_j^{\dagger}(t)c_j(t)c_j^{\dagger}c_j|\psi_0\rangle - \frac{1}{4}. \tag{4.28}$$

Análogo ao caso das correlações estáticas, usamos o teorema de Wick para reescrever a equação (4.28) em termos de valores esperados de dois operadores, da seguinte forma:

$$C_j^{\parallel}(t) = \langle\psi_0|c_j(t)c_j^{\dagger}(t)|\psi_0\rangle\langle\psi_0|c_jc_j^{\dagger}|\psi_0\rangle - \langle\psi_0|c_j(t)c_j^{\dagger}|\psi_0\rangle\langle\psi_0|c_j^{\dagger}(t)c_j|\psi_0\rangle - \frac{1}{4}. \tag{4.29}$$

Usando as equações (4.5) e (4.27), podemos escrever $C_j^{\parallel}(t)$ como:

$$C_j^{\parallel}(t) = \langle\psi_0|c_j(t)c_j^{\dagger}|\psi_0\rangle\langle\psi_0|c_j^{\dagger}(t)c_j|\psi_0\rangle. \tag{4.30}$$

Por conseguinte, explicitando $\langle\psi_0|c_j(t)c_j^{\dagger}|\psi_0\rangle$ em termos dos operadores de criação e aniquilação no espaço de momento, obtém-se que:

$$\langle\psi_0|c_j(t)c_j^{\dagger}|\psi_0\rangle = \frac{2}{L+1}\sum_{k,k'}\operatorname{sen}(kj)\operatorname{sen}(k'j)\,\langle\psi_0|a_k(t)a_{k'}^{\dagger}|\psi_0\rangle. \tag{4.31}$$

Note que $\langle\psi_0|a_k(t)a_{k'}^{\dagger}|\psi_0\rangle$ só é diferente de zero se $k = k'$ e $k > k_F$. Assim, é fácil mostrar que:

$$\langle\psi_0|a_k(t)a_{k'}^{\dagger}|\psi_0\rangle = \begin{cases} e^{-i\varepsilon_k t} & k = k' \text{ e } k > k_F \\ 0 & k = k' \text{ e } k \leq k_F \\ 0 & k \neq k' \end{cases}. \tag{4.32}$$

Desse modo, usando a equação (4.32), podemos reescrever o termo $\langle\psi_0|c_j(t)c_j^{\dagger}|\psi_0\rangle$ da seguinte forma:

$$\langle\psi_0|c_j(t)c_j^{\dagger}|\psi_0\rangle = \sum_{m=1}^{L/2}\operatorname{sen}^2(k_mj)\,e^{i\varepsilon_{k_m}t}, \tag{4.33}$$

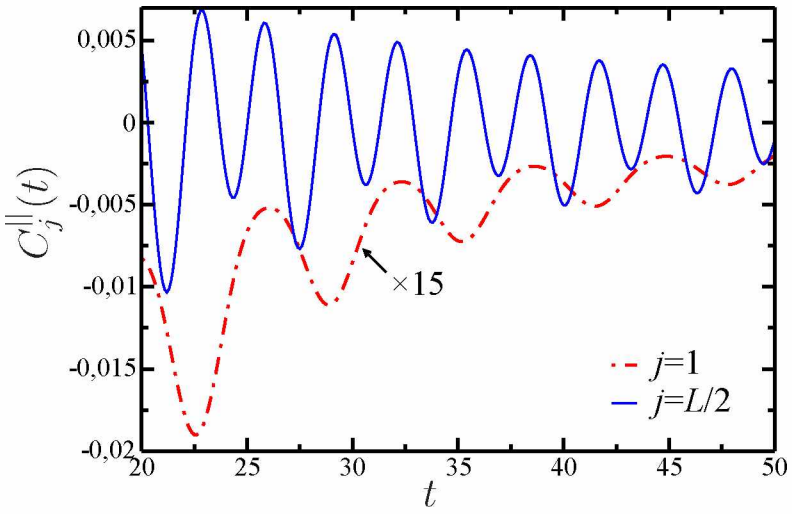


Figura 4.2: Componente longitudinal da autocorrelação dinâmica da borda ($j = 1$) e do *bulk* ($j = L/2$) de uma cadeia de Heisenberg XX com 300 sítios. Estes dados foram extraídos usando a equação (4.34). A fim de apresentar todos os dados nesta figura, multiplicamos por 15 os valores de $C^{\parallel}_{j=1}$.

sendo $k_m = \frac{m\pi}{L+1}$. Analogamente ao cálculo de $\langle\psi_0|c_j(t)c_j^\dagger|\psi_0\rangle$, encontramos $\langle\psi_0|c_j^\dagger(t)c_j|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|c_j(t)c_j^\dagger|\psi_0\rangle$. Portanto, a componente longitudinal da autocorrelação dinâmica é, finalmente, dada por:

$$C_j^{\parallel}(t) = \left[\sum_{m=1}^{L/2} \text{sen}^2\left(\frac{m\pi}{L+1}j\right) e^{i\varepsilon_{k_m}t}\right]^2 . \tag{4.34}$$

Para ilustrar o comportamento de $C_j^{\parallel}(t)$, mostramos na figura 4.2 a autocorrelação dinâmica da cadeia de Heisenberg XX para $j = 1$ (borda) e $j = \frac{L}{2}$ (*bulk*). Podemos observar a partir desta figura que $C_j^{\parallel}(t)$ apresenta oscilações cuja amplitude decai com o tempo. Além disso, note que esta autocorrelação apresenta comportamentos distintos para diferentes valores j. Isto acontece devido ao fato de estarmos considerando condições de contorno abertas. Vale a pena mencionar que se estivermos considerando condições de contorno periódicas podemos ver somente propriedades de *bulk*, não havendo distinção de $C_j^{\parallel}(t)$ para diferentes valores de j. É possível predizer o comportamento assintótico da autocorrelação usando teoria quântica de campos. A seguir, apresentaremos sucintamente as previsões da autocorrelação dinâmica baseadas em tal teoria.

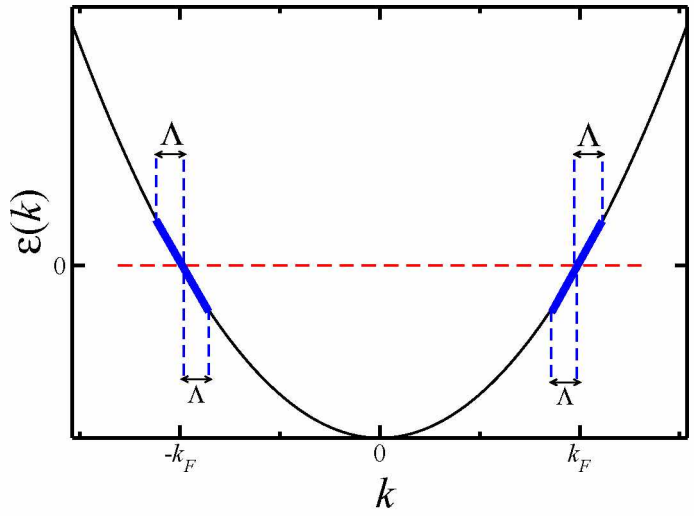


Figura 4.3: Ilustração de uma linearização da relação de dispersão $\varepsilon(k)$ em torno do momento de Fermi k_F. O alcance da validade da aproximação linear de $\varepsilon(k)$ é denotado por Λ.

4.2 Previsões da teoria de campos para a autocorrelação de spin de sistemas críticos

O limite de baixas energias de gases de Fermi unidimensionais é convenientemente tratado dentro do contexto do líquido de Tomanaga-Luttinger [75]. A teoria baseada no líquido de Tomanaga-Luttinger, ou simplesmente líquido de Luttinger, é capaz de descrever várias propriedades de sistemas de elétrons interagentes em uma dimensão. Esta teoria foi primeiramente proposta, em 1950, por Tomanaga que postulou que excitações de sistemas unidimensionais poderiam ser descritas por campos quantizados de ondas sonoras [185]. Em 1963, Luttinger reformulou o modelo proposto por Tomanaga e apresentou sua solução [14]. Contudo, a solução apresentada por Luttinger é incorreta e foi corrigida posteriormente por Mattis e Lieb [15]. Desde então, a teoria de LL é aplicada no estudo de diversas propriedades físicas de sistemas interagentes unidimensionais.

A teoria de líquido de Luttinger é baseada no estudo de contribuições de baixas energias para o sistema em estudo. Para tanto, dentro da estrutura desta teoria, é considerada uma linearização da relação de dispersão do sistema para estudar excitações de baixas energias. Apresentamos na figura 4.3 um exemplo ilustrativo desta linearização em torno do momento k_F. Podemos observar, a partir desta figura, que há um alcance Λ no qual esta aproximação linear de $\varepsilon(k)$ é assumida ser válida. Neste contexto, correlações estáticas e várias propriedades termodinâmicas de sistemas unidimensionais são bem descritas estudando somente as contribuições de baixas energias permitidas por esta aproximação. Todavia, diversos efeitos dinâmicos dependem de excitações de energia feitas fora do alcance de Λ. Por exemplo,

propriedades tais como densidade de estados e a largura relacionada ao fator de estrutura dinâmico não podem ser descritos pela teoria de líquido de Luttinger. Assim, é necessário que a curvatura de $\varepsilon(k)$ seja levada em conta para que a descrição física destes efeitos seja feita corretamente. Neste sentido, surgiram diversas extensões da teoria de LL conhecidas coletivamente como teoria de líquido de Luttinger não linear que incluem efeitos de curvaturas de banda.

Outro exemplo de efeito que não pode ser completamente descrito usando somente a teoria de líquido de Luttinger são as autocorrelações dinâmicas de spin de sistemas unidimensionais, as quais são discutidas neste capítulo. A contribuição de baixas energias no comportamento assintótico da componente longitudinal e transversal das autocorrelações dinâmicas do *bulk* e da borda, segundo a teoria de LL (veja por exemplo as referências [175, 186, 187]), é dada por:

$$C^{\parallel}_{\mathrm{LL}}(t,j) \sim t^{-\beta^{\parallel}}, \qquad C^{\perp}_{\mathrm{LL}}(t,j) \sim t^{-\beta^{\perp}}, \tag{4.35}$$

com expoentes

$$\beta^{\parallel}_{\mathrm{borda}} = 2, \qquad \beta^{\parallel}_{bulk} = 2K, \tag{4.36}$$

$$\beta^{\perp}_{\mathrm{borda}} = \frac{1}{K}, \qquad \beta^{\perp}_{bulk} = \frac{1}{2K}, \tag{4.37}$$

sendo K o parâmetro de Luttinger. Podemos observar a partir da equação (4.35) que apesar de ser visto um decaimento de $C^{\parallel/\perp}_{j}(t)$ em função do tempo, o comportamento oscilatório destas autocorrelações (presente até mesmo em sistemas não interagentes, veja a figura 4.2) não é previsto usando a teoria de líquido de Luttinger. Portanto, este resultado indica que somente contribuições de baixas energias não são suficientes para a descrição correta das autocorrelações de spin.

Usando uma extensão de modelos efetivos de impurezas móveis para nLL é possível prever o comportamento das oscilações da autocorrelação de spin. Neste sentido, considerando excitações de altas energias, é encontrado que o termo oscilatório das autocorrelações de spin tem o seguinte comportamento [42, 188]:

$$C^{\parallel}_{\mathrm{osc}}(t,j) \sim e^{-i\epsilon t} t^{\bar{\beta}^{\parallel}}, \tag{4.38}$$

$$C^{\perp}_{\mathrm{osc}}(t,j) \sim e^{-i\epsilon t} t^{\bar{\beta}^{\perp}}, \tag{4.39}$$

sendo ϵ a frequência de oscilação destas autocorrelações. Os expoentes $\bar{\beta}^{\parallel}$ e $\bar{\beta}^{\perp}$ das equações (4.38) e (4.39) são dados por:

$$\bar{\beta}^{\parallel}_{\mathrm{borda}} = \frac{3}{2} + \frac{(1-\gamma/\pi)^2}{K}, \tag{4.40}$$

$$\bar{\beta}^{\perp}_{\text{borda}} = \frac{3}{2} + \frac{(\gamma/\pi)^2}{K}, \tag{4.41}$$

$$\bar{\beta}^{\parallel}_{bulk} = \frac{1+K}{2} + \frac{(1-\gamma/\pi)^2}{2K}, \tag{4.42}$$

$$\bar{\beta}^{\perp}_{bulk} = \frac{1+K}{2} + \frac{(1-\gamma/\pi)^2}{2K}, \tag{4.43}$$

sendo γ o *phase shift* do sistema. Desse modo, é fácil ver que os expoentes de *bulk* e borda obedecem a seguinte relação:

$$2\bar{\beta}^{\parallel/\perp}_{bulk} - \bar{\beta}^{\parallel/\perp}_{\text{borda}} = K - \frac{1}{2}. \tag{4.44}$$

Note que a relação entre os expoentes de decaimento do termo oscilatório é independente de γ. Vale a pena ressaltar que o comportamento das autocorrelações apresentado acima é válido para qualquer sistema unidimensional integrável. Para o caso particular da cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$, é bem conhecido que o *phase shift* é $\gamma = \pi\,(1-K)$ [188]. Desse modo, os expoentes de decaimento do termo oscilatório das autocorrelações de spin podem ser escritos somente em termos de K da seguinte forma:

$$\bar{\beta}^{\parallel}_{\text{borda}} = K + \frac{3}{2}, \tag{4.45}$$

$$\bar{\beta}^{\perp}_{\text{borda}} = K + \frac{1}{K} - \frac{1}{2}, \tag{4.46}$$

$$\bar{\beta}^{\parallel}_{bulk} = \frac{1}{2} + K, \tag{4.47}$$

$$\bar{\beta}^{\parallel}_{bulk} = K + \frac{1}{2K} - \frac{1}{2}. \tag{4.48}$$

É importante mencionar que o comportamento de $C^{\parallel}_{bulk}(t)$ para a cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$ já é conhecido na literatura. Usando o modelo de Tomanaga-Luttinger, as técnicas de bosonização e o *ansatz* de Bethe, R. G. Pereira e colaboradores apresentaram uma previsão do comportamento assintótico de $C^{\parallel}_{bulk}(t)$ e dos expoentes de decaimento de tal autocorrelação [188]. No mesmo trabalho, os autores ainda apresentam resultados do grupo de renormalização da matriz de densidade dependente do tempo que corroboram com a previsão feita para $C^{\parallel}_{bulk}(t)$.

A fim de verificar as previsões da teoria quântica de campos relatadas anteriormente, apresentaremos a seguir resultados numéricos obtidos a partir do tDMRG.

4.3 Resultados numéricos para cadeias de spins

Nesta seção, verificaremos numericamente a previsão da dependência temporal assintótica das autocorrelações $C^{\parallel/\perp}(t,j)$ para cadeias críticas de spins com tamanho $L = 300$ e condições de contorno abertas. Para tanto, usamos o tDMRG adaptativo [81, 82] mantendo até $m = 300$ ($m = 450$) estados retidos para cadeias com spin $s = 1/2$ ($s = 1$ e $s = 3/2$). A evolução temporal foi realizada considerando a decomposição de Suzuki-Trotter de segunda ordem com um passo de tempo $0,025 \leq \delta t \leq 0,3$. Tipicamente, os pesos descartados no processo de truncamento do tDMRG estão no intervalo de $10^{-8} - 10^{-12}$. As fontes de erro no tDMRG tem duas origens:

(i) O erro de Trotter, o qual está relacionado com a decomposição de Suzuki-Trotter considerada. Esse erro é da ordem de $(\delta t)^{n+1}$ para uma decomposição de ordem n.

(ii) O erro associado com o número de estados descartados no processo de truncamento do tDMRG.

Esses erros podem ser controlados diminuindo o passo de tempo (δt) e aumentando o número de estados retidos na simulação do tDMRG.

Estamos interessados no comportamento de tempo longo da componente longitudinal e transversal das autocorrelações de spin na borda $C^{\parallel/\perp}_{\text{borda}}(t) = C^{\parallel/\perp}(t,1)$ e no *bulk* $C^{\parallel/\perp}_{bulk}(t) = C^{\parallel/\perp}(t,L/2)$. O comportamento assintótico destas autocorrelações pode ser descrito por uma combinação de leis de potência universais previstas pela teoria de LL e por termos oscilantes previstos pela teoria de nLL (veja a seção 4.2). Abaixo analisaremos detalhadamente este comportamento para a cadeia de Heisenberg de spin-s.

Modelo integrável de spin-$\frac{1}{2}$

Primeiramente, consideraremos a cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$, cuja hamiltoniana é dada por:

$$\hat{H}_{XXZ} = \sum_{i=1}^{L-1} \left[\frac{1}{2} \left(S_i^+ S_{i+1}^- + \text{h.c.} \right) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z \right], \tag{4.49}$$

sendo $\mathbf{S}_j$ o operador de spin-$\frac{1}{2}$ que atua no sítio j e Δ o parâmetro de anisotropia. Note que no ponto $\Delta = 0$ o modelo de Heisenberg XXZ é reduzido ao modelo de Heisenberg XX (veja a seção 4.1). É bem conhecido que a cadeia de Heisenberg com spins semi-inteiros é crítica e invariante conforme para valores de Δ no intervalo de $-1 < \Delta \leq 1$ [114, 146, 189, 190]. Nesta região, o parâmetro de Luttinger (K) e a frequência de oscilação[1] (ϵ) da cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$ podem ser obtidos exatamente em função de Δ via *ansatz* de Bethe, sendo

[1]Para o caso de modelos integráveis, a frequência de oscilação ϵ é a velocidade do som do sistema.

dados por:

$$K = \frac{\pi}{2\left[\pi - \arccos\left(\Delta\right)\right]}, \tag{4.50}$$

$$\epsilon = \frac{\pi\sqrt{1-\Delta^2}}{2\arccos\left(\Delta\right)}. \tag{4.51}$$

Particularmente, para investigar as autocorrelações dinâmicas, estaremos interessados na região crítica com parâmetro de anisotropia positivo, isto é $0 \leq \Delta \leq 1$[2]. De acordo com as equações (4.35), (4.38) e (4.39), as partes reais das autocorrelações devem se comportar como:

$$\mathrm{Re}\left[C^{\parallel}_{\mathrm{borda}}(t)\right] = \frac{A^{\parallel}_1}{t^2} + \frac{A^{\parallel}_2\cos\left(Wt+\varphi\right)}{t^{\frac{3}{2}+\xi}}, \tag{4.52}$$

$$\mathrm{Re}\left[C^{\parallel}_{bulk}(t)\right] = \frac{B^{\parallel}_1}{t^2} + \frac{B^{\parallel}_2}{t^{2\xi}} + \frac{B^{\parallel}_3\cos\left(Wt+\varphi\right)}{t^{\frac{1}{2}+\xi}} + \frac{B^{\parallel}_4\cos\left(2Wt+\tilde{\varphi}\right)}{t^{\zeta}}, \tag{4.53}$$

$$\mathrm{Re}\left[C^{\perp}_{\mathrm{borda}}(t)\right] = \frac{A^{\perp}_1}{t^{\frac{1}{\xi}}} + \frac{A^{\perp}_2\cos\left(Wt+\varphi\right)}{t^{\xi+\frac{1}{\xi}-\frac{1}{2}}}, \tag{4.54}$$

$$\mathrm{Re}\left[C^{\perp}_{bulk}(t)\right] = \frac{B^{\perp}_1}{t^{\frac{1}{2\xi}}} + \frac{B^{\perp}_2}{t^2} + \frac{B^{\perp}_3\cos\left(Wt+\varphi\right)}{t^{\xi+\frac{1}{2\xi}-\frac{1}{2}}}. \tag{4.55}$$

Nas equações (4.52)-(4.55) impusemos a restrição de que a dependência da interação de todos os expoentes para o modelo de Heisenberg XXZ (*bulk* ou borda, baixas energias ou altas energias) pode ser expressada em termos de um único parâmetro ξ. A previsão teórica é que ξ seja igual ao parâmetro de Luttinger ($\xi = K$) e que a frequência dos termos oscilantes W seja igual a velocidade do som da cadeia ($W = \epsilon$). Na equação (4.53), incluímos o termo oscilante com frequência $2W$, cuja contribuição vem de um buraco em $k = 0$ e uma partícula em $k = \pi$ [188]. O expoente de decaimento previsto, correspondente a este termo, é $\zeta = 1$ para $\Delta = 0$ e $\zeta = 2$ para o intervalo $0 < \Delta < 1$ e $t \gg \frac{1}{\Delta^2}$. A seguir, verificaremos as previsões analíticas da teoria de nLL ajustando os dados do tDMRG usando as equações (4.52)-(4.55).

Antes de apresentar o ajuste de nossos resultados, vamos comparar os resultados de $C^{\parallel}(t,j)$ da cadeia de Heisenberg XX com spin-$\frac{1}{2}$ obtidos pelo tDMRG com o resultado exato apresentado na equação (4.34). Para tanto, apresentamos na figura 4.4 a diferença entre estes resultados. Os dados do tDMRG mostrados nesta figura foram obtidos considerando $m = 200$ e $\delta t = 0,1$. Como podemos observar, os resultados obtidos numericamente estão em perfeito acordo com os resultados exatos. É interessante notar que os erros das estimativas numéricas estão no intervalo de $10^{-4} - 10^{-6}$, os quais são menores que o erro relacionado à decomposição de Suzuki-Trotter de segunda ordem $\left[(\delta t)^3 = 10^{-3}\right]$.

[2]Para $-1 < \Delta < 0$ há estados ligados (veja a seção seguinte), os quais não foram considerados na teoria de nLL.

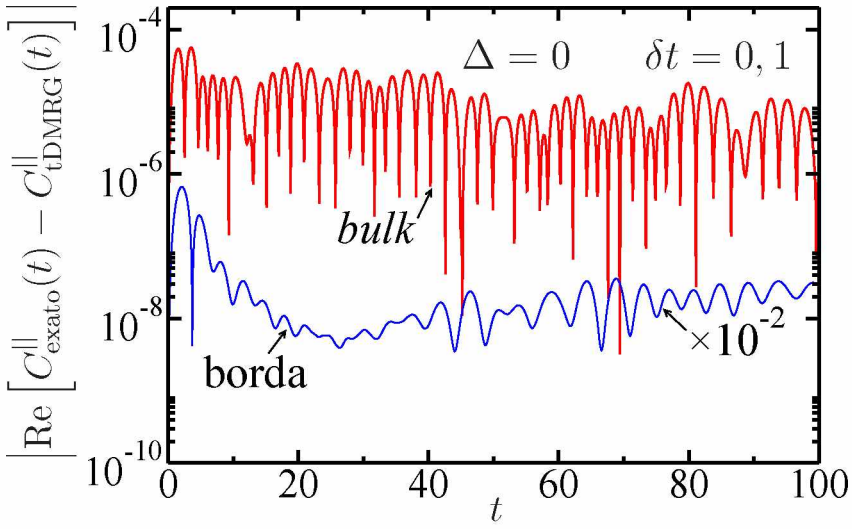


Figura 4.4: As diferenças entre as partes reais dos resultados exatos [equação (4.34)] e os dados do tDMRG para as autocorrelações $C^{\parallel}(t,j)$ da cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$ com $L = 300$ e $\Delta = 0$. O caso de *bulk* (borda) corresponde à $j = L/2$ ($j = 1$). Consideramos $m = 200$ no processo de truncamento do tDMRG e um passo de tempo de $\delta t = 0,1$. A fim de mostrar os dados de *bulk* e borda na mesma figura, multiplicamos os resultados de $C^{\parallel}_{\mathrm{borda}}(t)$ por 10^{-2}.

Os resultados apresentados na figura 4.4 mostram que podemos obter resultados precisos para $C^{\parallel}_{\mathrm{borda}/bulk}(t)$ usando $m = 200$ e $\delta t = 0,1$. Para valores de $\Delta \neq 0$, não temos resultados exatos para comparar com os resultados numéricos. Nestes casos, a fim de estimar os erros numéricos, comparamos as autocorrelações $C^{\parallel/\perp}_{\mathrm{borda}/bulk}(t)$ para diferentes valores de m ($m =$ 100, 200 e 300) e passos de tempo δt ($\delta t = 0,3$, 0,1 e 0,025). No geral, estimamos que os erros são pelo menos uma ordem de magnitude menor que os valores das autocorrelação obtidos pelo tDMRG.

Alguns exemplos típicos de dados numéricos ajustados pelas equações (4.52)-(4.55) são mostrados na figura 4.5. Os parâmetros ξ e W obtidos através do ajuste dos dados numéricos são mostrados na tabela 4.1 para alguns valores do parâmetro de anisotropia Δ. No geral, todos os parâmetros obtidos através do ajuste estão em acordo com a previsão teórica apresentada na última coluna da tabela 4.1. No procedimento de ajuste das curvas, os dados do tDMRG estão dentro do intervalo $15 < t < 80$. Notamos que o parâmetro ξ muda levemente dependendo do intervalo de tempo considerado no ajuste. Uma das maiores discrepâncias encontradas para este parâmetro corresponde ao caso da componente longitudinal da autocorrelação de spin da borda para $\Delta = 0,8$ (veja a tabela 4.1). Embora este expoente ($\xi = 0,459$) seja levemente diferente do valor previsto ($K = 0,6287$), encontramos uma boa concordância do ajuste dos dados usando a equação (4.52) se consideramos $\xi = K$ fixo, como

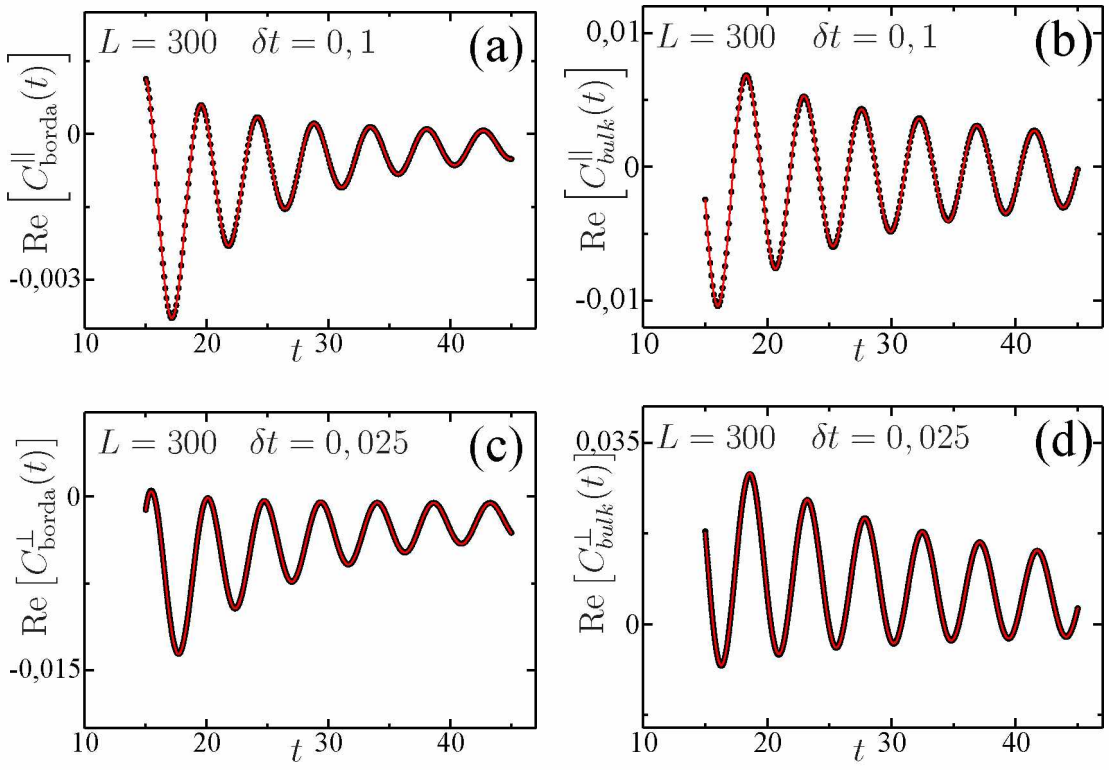


Figura 4.5: Partes reais das autocorrelações $C^{\parallel/\perp}_{\text{borda}/bulk}(t)$ em função do tempo t para a cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$ com $\Delta = 0,6$, $L = 300$ e $m = 200$. Usamos $\delta t = 0,1$ e $\delta t = 0,025$ para a autocorrelação de spin longitudinal e transversal, respectivamente. Os símbolos são os dados do tDMRG e as linhas sólidas são os ajustes dos nossos dados usando as equações (4.52)-(4.55) (veja o texto).

mostrado na figura 4.6. É interessante notar também que, mesmo que os valores ajustados de ξ para alguns valores de Δ não sejam tão próximos dos valores previstos, encontramos que $\left|2\bar{\beta}^{\parallel/\perp}_{bulk} - \bar{\beta}^{\parallel/\perp}_{\text{borda}} - K + \frac{1}{2}\right| < 0,06$, que está em acordo com a previsão da relação entre estes expoentes (veja a equação 4.44).

Efeitos de estados ligados e bandas quase planas

Até este momento, discutimos somente o comportamento das autocorrelações de spin para sistemas unidimensionais integráveis. Antes de apresentarmos uma análise destas autocorrelações para modelos não integráveis, vamos descrever algumas situações nas quais as previsões apresentadas na seção 4.2 não são válidas. Primeiramente, o modelo de impureza móvel que consideramos assume um único tipo de excitação de alta energia, a qual é suficiente para descrever as oscilações nas funções de autocorrelação. Isto é equivalente a assumir que, no domínio de frequência, a não analiticidade de energia finita dominante ocorre na borda da

Tabela 4.1: Valores do parâmetro ξ e da frequência de oscilação W das autocorrelações de spin $C^{\parallel/\perp}_{\text{borda}/bulk}(t)$ para alguns valores de anisotropia Δ da cadeia de Heisenberg XXZ com spin-$\frac{1}{2}$. Os parâmetros ξ e W foram obtidos ajustando os dados do tDMRG usando as equações (4.52)-(4.55). Na última coluna desta tabela mostramos a previsão teórica para estes parâmetros.

		$C^{\parallel}_{\text{borda}}$	$C^{\parallel}_{bulk}$	$C^{\perp}_{\text{borda}}$	$C^{\perp}_{bulk}$	Exato
$\Delta = 0$	ξ	0,992	1,006	0,943	0,981	1
	W	1,002	1,000	1,000	1,002	1
$\Delta = 0,3$	ξ	0,849	0,829	0,836	0,893	0,8375
	W	1,182	1,183	1,184	1,186	1,1835
$\Delta = 0,6$	ξ	0,677	0,678	0,711	0,595	0,7093
	W	1,355	1,355	1,356	1,358	1,3551
$\Delta = 0,8$	ξ	0,459	0,554	0,649	0,585	0,6287
	W	1,466	1,465	1,467	1,468	1,4646

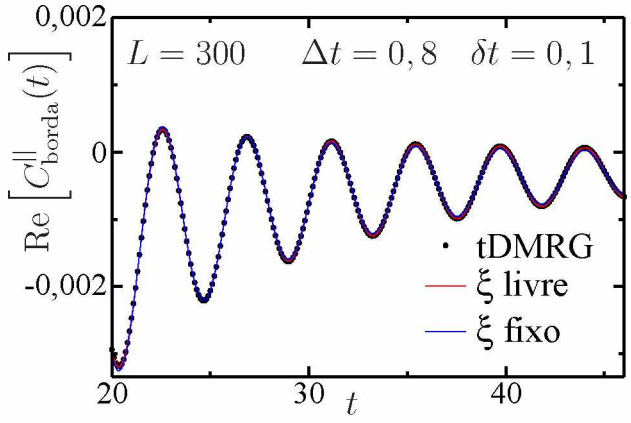


Figura 4.6: Parte real da componente longitudinal da autocorrelação de spin $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$ em função de t para a cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$ com anisotropia $\Delta = 0,8$ e $L = 300$. Os dados foram obtidos usando 200 estados retidos e um passo de tempo de $\delta t = 0,1$. Ajustamos os dados do tDMRG usando a equação (4.52) considerando o parâmetro ξ livre ou fixo ($\xi = K$).

banda de excitações de buracos simples. Contudo, funções de correlação mais gerais podem conter singularidades adicionais em frequências correspondentes a estados ligados que estão ausentes no modelo não interagente. Neste caso, termos oscilatórios adicionais podem surgir no comportamento assintótico de $C^{\parallel/\perp}_{\text{borda}/bulk}(t)$ tal que o decaimento destas autocorrelações pode acontecer mais lentamente do que o decaimento considerado nas equações (4.52)-(4.55). Enquanto estados ligados podem ser incorporados em modelos de impurezas móveis mais gerais [191], neste trabalho procuramos exemplos de sistemas no qual a existência de estados ligados pode ser descartada.

A assinatura de estados ligados pode ser observada no fator de estrutura de spin longitudinal

$$S^{\parallel}(q,\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t}\sum_{j} e^{-iqj} C^{\parallel}_{bulk}(t,j). \tag{4.56}$$

É bem conhecido que para a cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$ com $-1 < \Delta < 0$, a qual está em um regime crítico, mas é equivalente a férmions sem spin com interações atrativas, $S^{\parallel}(q,\omega)$ exibe um pico estreito acima do contínuo de dois *spinons* [188]. Este pico pode ser interpretado dentro da teoria de campo efetiva como um estado ligado de uma partícula com alta energia com um buraco de alta energia. Neste contexto, na figura 4.7, mostramos $S^{\parallel}(q,\omega)$ para $\Delta = -0,25$. Embora este estado ligado esteja dentro de um contínuo de múltiplos pares partícula-buraco, esperamos que para modelos integráveis o pico no fator de estrutura de spin longitudinal não seja alargado por processos de decaimento e seja dado por uma função delta, isto é, $S^{\parallel}(q,\omega) \sim \delta\left[\omega - \Omega_{\text{el}}(q)\right]$, sendo $\Omega_{\text{el}}(q)$ a relação de dispersão do estado ligado. Em nossos resultados numéricos observamos que o pico tem uma largura finita devido à resolução de frequência ser limitada pelo tempo finito nos dados do tDMRG. Contudo, como mostrado na figura 4.7(b), $S^{\parallel}(q,\omega)$ se torna mais estreito na medida que o tempo aumenta. Isto é uma forte evidência da existência de um estado ligado no espectro de energia.

Outra situação que limita a aplicabilidade do nosso modelo de impureza móvel é quando o espectro de excitação contém partículas com massa efetiva M grande, isto é, na presença de bandas quase planas. Os expoentes de decaimento das oscilações das autocorrelações de spin são válidos para tempos grandes comparados ao inverso da curvatura de banda, no regime $t \gg Ma^2$, sendo a o espaçamento de rede. Portanto, se a massa efetiva é grande, o comportamento assintótico somente será observado após tempos extremamente longos que vão além do alcance do método do tDMRG.

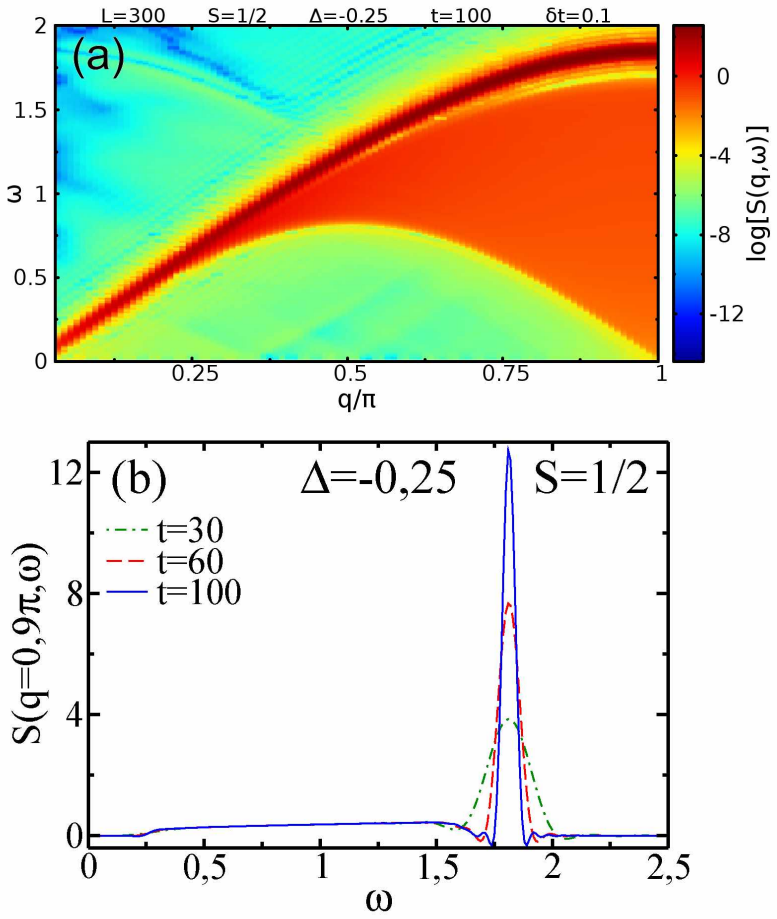


Figura 4.7: (a) Fator de estrutura de spin longitudinal da cadeia de Heisenberg de spin-$\frac{1}{2}$ com anisotropia $\Delta = -0,25$ e $L = 300$. Os dados foram obtidos usando $m = 200$ e $\delta t = 0,1$. (b) Formas de linha de $S^{\parallel}(q = 0,9\pi, \omega)$ obtidas para diferentes valores de tempo máximo.

Cadeias de spin-s

Com as limitações de nossa previsão em mente, voltamos ao estudos de autocorrelações de modelos não integráveis. Em princípio, uma forma simples de quebrar a integrabilidade da cadeia de Heisenberg XXZ de spin-$\frac{1}{2}$ (enquanto preserva o espectro de gap nulo assim como U(1) e simetrias discretas) é adicionar acoplamentos de troca entre segundos vizinhos, por exemplo $\delta H \sim \sum_j S^z_j S^z_{j+2}$. Contudo, é bem conhecido que o tDMRG adaptativo em sua versão tradicional é restrito ao estudo de sistemas unidimensionais com somente interações de primeiros vizinhos. Por esta razão, estudamos cadeias críticas de spin-s com $s > \frac{1}{2}$ [107, 108, 114, 189] como exemplos de modelos não integráveis. Assim, consideramos a hamiltoniana

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{L-1} \left(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z \right) + D \sum_{j=1}^{L-1} \left(S_j^z \right)^2 , \tag{4.57}$$

sendo que $\mathbf{S}_j$ é o operador de spin-s que atua no sítio j, Δ é a anisotropia de troca e D é a anisotropia de íon simples.

As expressões para os operadores de spin-s dentro da teoria quântica de campos efetiva de baixa energia podem ser obtidas notando que cadeias com spins $s = \frac{n}{2}$ podem ser representadas por escadas de n pernas no limite em que o forte acoplamento dos degraus selecionam multipletos de spin-s dos spins locais $s = \frac{1}{2}$ [114, 189, 192]. Por exemplo, para $s = 1$ podemos escrever $\mathbf{S}_j = \sigma_j + \tau_j$, sendo σ_j e τ_j dois operadores de spin-$\frac{1}{2}$ que comutam entre si. Usando a transformação de Jordan-Wigner nestes operadores, o modelo fermiônico resultante passa a ser fortemente interagente (e contém interações de longo alcance). Contudo, o setor de baixa energia deste modelo por ser tratado por bosonização e uma análise de grupo de renormalização [114, 189, 192]. A fase crítica com carga central $c = 1$ (análogo à cadeia de Heisenberg de spin-1/2 com $|\Delta| < 1$) pode ser entendida como o resultado de manter somente um ramo de gap nulo e os demais ramos possuindo um gap finito.

Aqui, vamos além do regime de baixas energias aplicando a teoria de Luttinger não linear para investigar as autocorrelações de spin na fase crítica da hamiltoniana apresentada na equação (4.57). A partir desta teoria, encontramos um deslocamento de frequência e um decaimento exponencial do termo oscilante da autocorrelação de spin na borda de sistemas unidimensionais não integráveis. No caso de *bulk*, o modelo de impureza móvel da teoria de nLL pode ser aplicado fenomenologicamente identificando os limiares do espectro em fatores de estrutura de spin. Para mais detalhes desta previsão veja a referência [42].

Como primeira tentativa de estudar cadeias de spins-s com $s > \frac{1}{2}$, calculamos o fator de estrutura de spin longitudinal para o modelo descrito pela hamiltoniana (4.57) com $D = 0$ e valores de spin $s = 1$ e $s = \frac{3}{2}$. Os resultados para dois valores representativos de Δ são mostrados na figura 4.8. Para ambos valores de s, notamos um limiar quase sem dispersão no peso espectral em $q \approx \pi$. Este comportamento é característico de excitações de energia finita com massa efetiva grande, o qual impede a aplicação direta de nossa teoria uma vez que elas introduzem uma pequena curvatura de banda.

Focando em cadeias com $s = 1$, variamos os parâmetros da equação (4.57) procurando por um regime com uma maior curvatura do espectro próximo de $q = \pi$. Notavelmente, o gap no espectro de $S^{\parallel}(q \approx \pi, \omega)$ é consistente com a teoria de baixas energias para cadeias críticas de spin-1 uma vez que a parte oscilante do operador S_j^z excita modos massivos [114, 189, 192]. Consideramos o modelo (4.57) com anisotropia de troca $\Delta = -0,1$ e anisotropia de íon simples $D = -1$, o qual encontra-se na fase crítica [193]. A figura 4.9 mostra neste caso

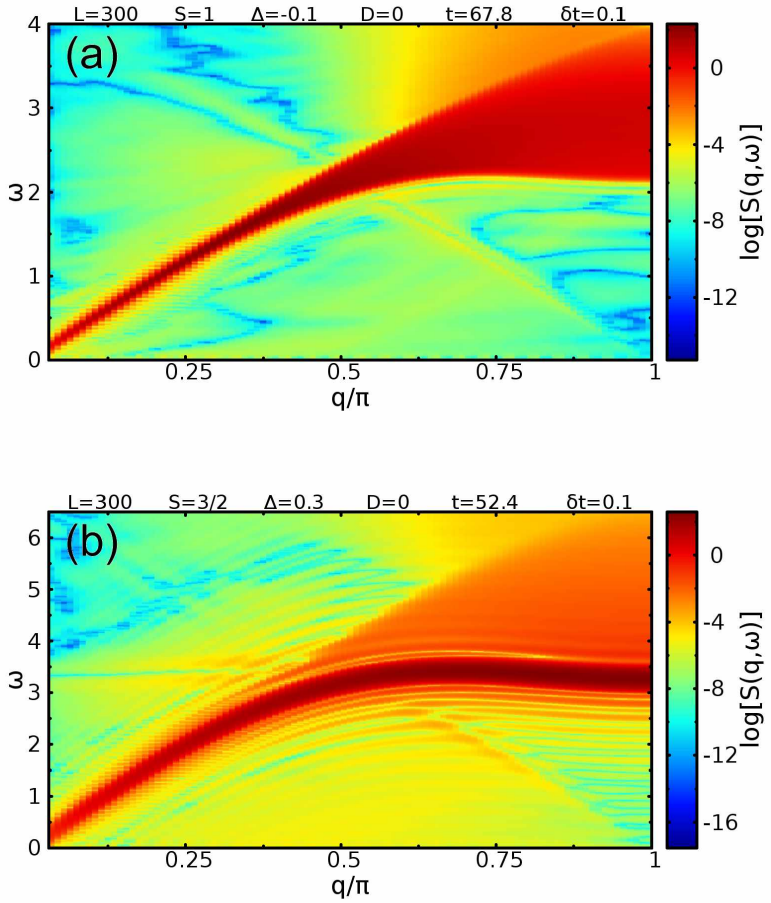


Figura 4.8: O fator de estrutura de spin longitudinal para cadeias críticas XXZ com spin-s. (a) Resultados para $s = 1$ e $\Delta = -0,1$ e (b) para $s = \frac{3}{2}$ e $\Delta = 0,3$.

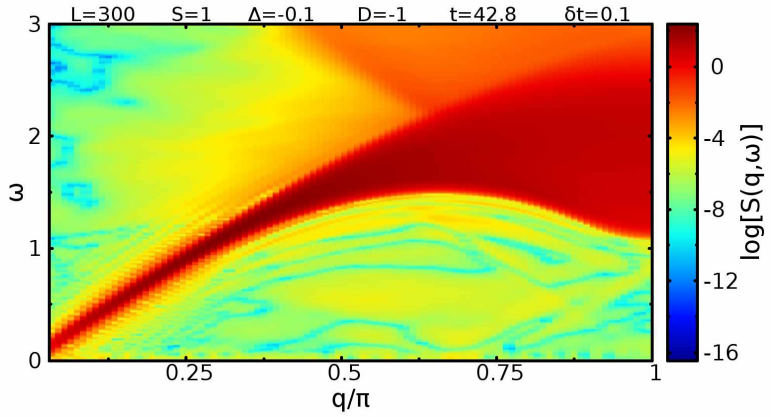


Figura 4.9: O fator de estrutura de spin longitudinal para a cadeia XXZ de spin-1 com anisotropia de íon simples para $\Delta = -0,1$ e $D = -1$.

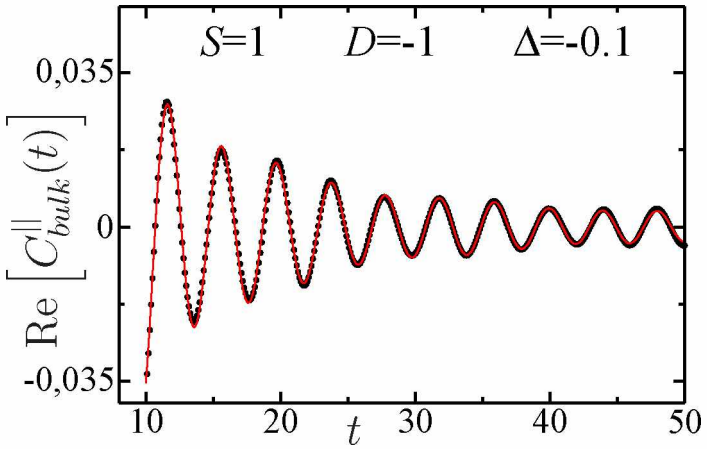


Figura 4.10: Parte real da autocorrelação de spin $C^{\parallel}_{bulk}(t)$ em função de t para a cadeia de spin-1 com $\Delta = -0,1$, $D = -1$ e $L = 300$. Os símbolos são os dados numéricos obtidos pelo tDMRG e a linha sólida é o ajuste dos dados usando a equação (4.58). Através do ajuste dos dados obtivemos as frequências $W_1 = 1,55$ e $W_2 = 1,11$ e os expoentes $\beta_1 = 1,57$ e $\beta_2 = 1,76$.

que o limiar mais baixo de $S^{\parallel}(q,\omega)$ tem um gap menor e uma maior curvatura de banda em $q = \pi$. Note também que não há evidência de estados ligados no espectro da figura 4.9.

Baseado na teoria de Luttinger não linear, encontramos que, análogo ao caso de sistemas integráveis, a autocorrelação de *bulk* de sistemas não integráveis exibe um decaimento de lei de potência dos termos oscilantes. As frequências das oscilações podem ser entendidas a partir do espectro de $S^{\parallel}(q,\omega)$ como os valores de frequência ω no qual o limiar mais baixo dispersa parabolicamente. No caso de cadeias de spin-$\frac{1}{2}$, há somente uma frequência correspondente à borda da banda de excitações de buracos simples. Em contrapartida, podemos observar na figura 4.9 duas frequências que podem ser identificadas como "bordas" do suporte: $W_1 \approx 1,5$ (em $q \approx 0,65\pi$) e $W_2 \approx 1,1$ (em $q \approx \pi$). Assim, ajustamos a autocorrelação $C^{\parallel}_{bulk}(t)$ obtida pelo tDMRG usando uma expressão de duas frequências, dada por:

$$\mathrm{Re}\left[C^{\parallel}_{bulk}(t)\right] = \frac{B^{\parallel}_0}{t^2} + \frac{B^{\parallel}_1 \cos\left(W_1 t + \varphi_1\right)}{t^{\beta_1}} + \frac{B^{\parallel}_2 \cos\left(W_2 t + \varphi_2\right)}{t^{\beta_2}}. \tag{4.58}$$

Note que em contraste à equação (4.53), aqui incluímos o termo não oscilante $\sim t^{-2}$, associado ao modo de gap nulo em $q = 0$, mas omitimos o termo $\sim t^{-2K}$ que no caso de spin-$\frac{1}{2}$ deriva da parte $q = \pi$ do operador S^z_j na teoria de LL. O resultado do ajuste é mostrado na figura 4.10. Note que as frequências obtidas pelo ajuste são consistentes com as bordas do espectro observado na figura 4.9.

Por fim, analisaremos o comportamento da autocorrelação de borda $C^{\parallel}_{\mathrm{borda}}(t)$ para o caso de spin-1 com $\Delta = -0,1$ e $D = -1$. Para modelos não integráveis, nossa análise da teoria quântica de campos efetiva prediz que os operadores de borda introduzem um

deslocamento de frequência não universal e uma taxa de decaimento para o modo de alta energia. Os resultados numéricos indicam que os dados podem ser ajustados por um único termo oscilante. Desse modo, ajustamos os dados de $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$ obtidos pelo tDMRG usando duas funções, sendo elas:

$$f_1(t) = \frac{A_1}{t^2} + \frac{A_2^{\text{lp}} \cos(W't + \varphi_1)}{t^{\beta}} \tag{4.59}$$

e

$$f_1(t) = \frac{A_1^{'}}{t^2} + A_2^{\text{exp}} \cos(W't + \varphi_2) e^{-\gamma t}. \tag{4.60}$$

Encontramos $W' \approx 1,75$ para ambas funções de ajuste. Esta frequência é claramente diferente das frequências da borda da banda W_1 e W_2 obtidas ajustando a autocorrelação de *bulk* e encontra-se no contínuo de $S^{\parallel}(q,\omega)$ (veja a figura 4.9). Este resultado é consistente com a previsão de um deslocamento de frequência não universal para modelos não integráveis. Além disso, podemos ver na figura 4.11(a) que o ajuste dos dados numéricos para $t > 15$ usando a equação (4.59) superestima a amplitude das oscilações em tempos longos ($t \gtrsim 45$), sugerindo que o decaimento desta amplitude é mais rápido do que uma lei de potência. De fato, encontramos uma melhor concordância entre o ajuste e os valores obtidos pelo tDMRG de $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$ se consideramos um decaimento exponencial do termo oscilante com $\gamma \approx 0,059$ [veja a equação (4.60)]. É importante ressaltar que o tempo de relaxação ajustado $1/\gamma \approx 17$ é menor que a escala de tempo alcançada pelo tDMRG.

A fim de observar uma assinatura clara do decaimento exponencial de $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$, é conveniente subtrair o termo não oscilante t^{-2} da função de autocorrelação. Esta subtração é importante devido ao fato de que a diferença entre a lei de potência e o decaimento exponencial das oscilações se torna mais pronunciada em tempos longos. O prefator não universal $A_1^{'}$ na equação (4.60) pode ser relacionado ao prefator do termo uniforme da função de correlação estática $C^{\parallel}_{1j} = \langle\psi_0|S^z_1 S^z_j|\psi_0\rangle$. Usando a teoria de líquido de Luttinger, é possível mostrar que, no caso de spin-1, o termo uniforme de $C^{\parallel}_{1j}$ e o termo não oscilante t^{-2} da autocorrelação $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$ são dados por [42]:

$$C^{\parallel}_{1j} \approx -\frac{2\sqrt{2K}C}{\pi^2 j^2} \tag{4.61}$$

e

$$C^{\parallel}_{\text{borda}}(t) \approx -\frac{4C^2}{\pi^2 v^2 t^2}, \tag{4.62}$$

sendo C um coeficiente não universal e v a velocidade do som do sistema. Portanto, podemos notar que se estimarmos C a partir do ajuste das correlações estáticas poderemos então

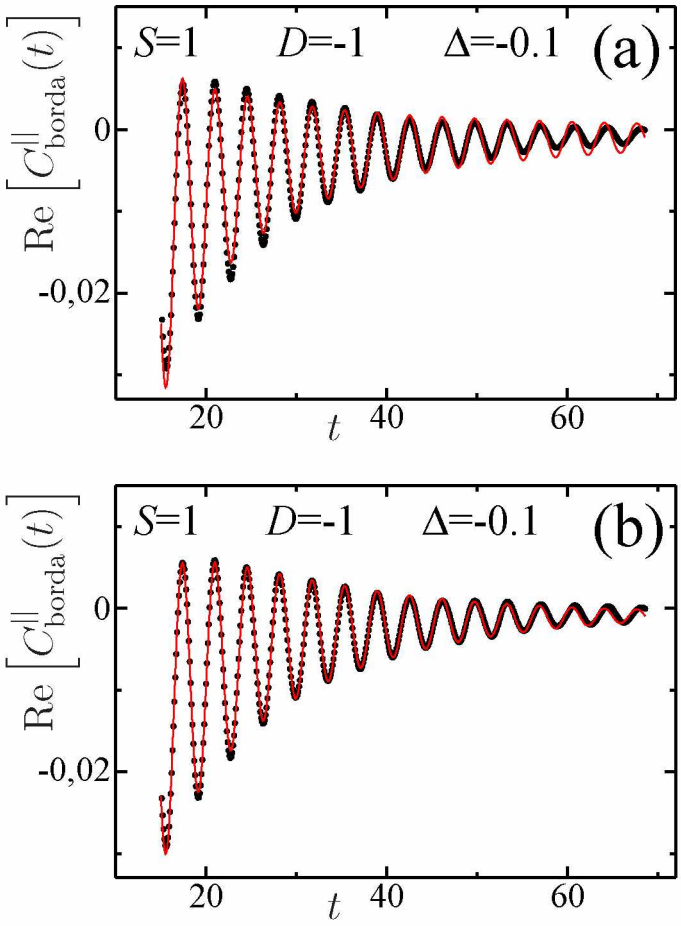


Figura 4.11: Parte real da componente longitudinal da autocorrelação de spin $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$ em função do tempo para a cadeia de spin-1 com $\Delta = -0,1$, $D = -1$ e $L = 300$. Os símbolos são resultados do tDMRG e as linhas sólidas são ajustes destes resultados. Os dados foram obtidos usando $m = 350$ e $\delta t = 0,1$. (a) Ajuste dos dados numéricos considerando um decaimento de lei de potência da amplitude das oscilações de $C^{\parallel}_{\text{borda}}(t)$ [equação (4.59)]. (b) Ajuste dos dados considerando um decaimento exponencial destas oscilações [equação (4.60)].

determinar o prefator $A_1^{'}$. Vale ressaltar que o parâmetro de Luttinger K e a velocidade do som v podem ser determinados, independentemente, analisando as correções de tamanho finito dos estados de baixas energias juntamente com o maquinário de teoria de campos conforme [194] (veja por exemplo a referência [166]). Neste sentido, encontramos para a cadeia de spin-1 com $\Delta = -0,1$ e $D = -1$ os seguintes valores: $K = 1,285$ e $v = 1,211$. Usando este valor de K e ajustando os dados da correlação estática obtidos pelo DMRG usando a equação (4.61) encontramos $C = 2,8423$. O resultado de $A_1^{'}$ é imediato uma vez que determinamos v e C, sendo ele $A_1^{'} = -\frac{4C^2}{\pi^2 v^2} = 2,233$.

Finalmente, mostramos na figura 4.12 o resultado numérico das autocorrelações de borda depois de subtrair o termo não oscilante $A_1^{'}/t^2$. É claro a partir desta figura que a ampli-

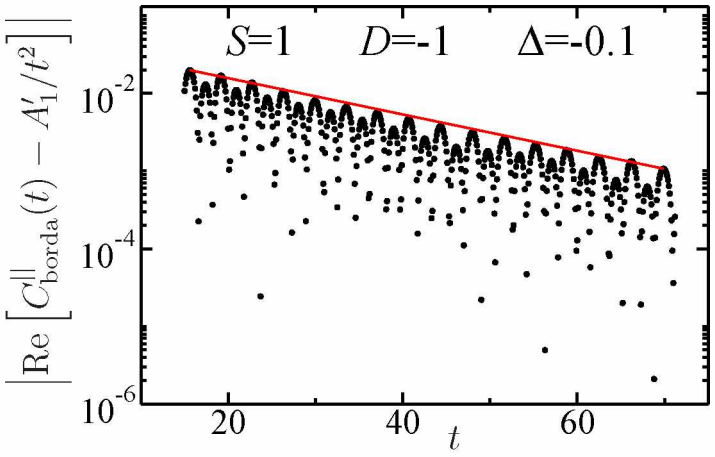


Figura 4.12: Resultados da componente longitudinal da autocorrelação $C^{\parallel}_{\mathrm{borda}}(t)$ depois de subtrair o termo não oscilante $\frac{A_1'}{t^2}$. O prefator $A_1' = 2,233$ foi obtido de maneira independente (veja texto). A inclinação da linha vermelha é aproximadamente -0,053.

tude das oscilações decai linearmente em uma escala log-linear. Este resultado indica um decaimento exponencial do termo oscilante das autocorrelações de borda, em acordo com a previsão mencionada anteriormente.

Conclusões e perspectivas futuras

Nesta tese estudamos três problemas específicos, sendo eles a determinação: (i) de propriedades estáticas das escadas de Heisenberg de N pernas com spin-s, (ii) do comportamento de escala da entropia de emaranhamento de escadas quânticas críticas e (iii) das correlações dinâmicas em sistemas quânticos unidimensionais. A maioria dos modelos investigados neste trabalho não possuem solução exata conhecida. Assim, a abordagem numérica é a forma mais eficaz e precisa de estudar tais modelos. Atualmente, uma das técnicas mais poderosas no estudo de sistemas fortemente correlacionados quase-unidimensionais é o grupo de renormalização da matriz de densidade. A implementação desta técnica é altamente não trivial caso seja desejado um código eficiente. A maior parte dos resultados exibidos ao longo desta tese foram obtidos usando o DMRG. Por este motivo, no capítulo 1, fizemos uma revisão deste método e de algumas de suas extensões desenvolvidas para estudar sistemas que evoluem no tempo. A seguir faremos uma breve conclusão dos resultados encontrados de cada problema estudado neste trabalho.

No capítulo 2, apresentamos um estudo das *escadas de Heisenberg* de N pernas com spin-s. Enquanto a física de baixas energias das cadeias de Heisenberg de spin-s e escadas de Heisenberg de spin-$\frac{1}{2}$ foi estudada em diversos trabalhos (veja por exemplo as referências [44, 94, 112–116, 143]), pouco é conhecido sobre escadas de Heisenberg com $s \geq 1$. Neste contexto, usamos o DMRG para estimar a energia do estado fundamental por sítio, e_∞^N, no limite termodinâmico para estas escadas. A fim de testar se nossas estimativas são confiáveis, reproduzimos resultados existentes na literatura das cadeias de Heisenberg de spin-s e das escadas de Heisenberg de spin-$\frac{1}{2}$. Como pode ser visto detalhadamente no capítulo 2, encontramos uma perfeita concordância entre nossas estimativas e resultados já conhecidos. Uma vez que somos capazes de obter estimativas precisas de e_∞^N para valores de $N \leq 6$, extrapolamos estas energias para obter uma estimativa da energia do estado fundamental por sítio do modelo de Heisenberg bidimensional $\left(e_\infty^{2D}\right)$. Apesar dos pequenos valores de N utilizados na extrapolação, encontramos uma boa concordância entre a nossa estimativa de e_∞^{2D} para o caso de $s = \frac{1}{2}$ com o resultado obtido por Wiese e Ping usando o método de Monte Carlo [138].

Ainda no capítulo 2, apresentamos estimativas do gap de spin Δ_s, as quais são desconhecidas, principalmente para $N > 1$ e $s \geq 1$. O comportamento do gap de spin das cadeias de Heisenberg de spin-s foi conjecturado por Haldane [107, 108]. Em um trabalho seminal, Haldane mapeou o modelo de Heisenberg unidimensional no modelo σ não linear e encontrou que o gap de spin é finito e diferente de zero (nulo) para cadeias com spins inteiros (semi-inteiros). Embora a aproximação semiclássica feita por Haldane seja válida para $s \gg 1$, a conjectura proposta por este autor foi verificada numericamente para $s \geq \frac{1}{2}$. Uma generalização desta conjectura foi feita por Sénéchal [109] e Sierra [110] para o caso das escadas de Heisenberg de N pernas. Estes autores encontraram que o gap de spin das escadas de Heisenberg não depende somente do valor do spin, mas também depende do número de pernas. Neste contexto, eles encontraram que escadas com sN inteiro (semi-inteiro) possuem um gap de spin finito e diferente de zero (nulo). Enquanto há fortes evidências de que a conjectura de Haldane-Sénéchal-Sierra seja válida para $s = \frac{1}{2}$, poucos trabalhos consideram escadas com $s \geq 1$. Neste sentido, estimamos Δ_s para escadas com até seis pernas e $s \leq \frac{5}{2}$. Dentro da nossa precisão alcançada no DMRG, nossos resultados estão em acordo com a conjectura Haldane-Sénéchal-Sierra.

Por fim, investigamos a existência de estados de borda nas escadas de Heisenberg. Encontramos que escadas com um número ímpar de pernas e condições de contorno abertas apresentam spins de borda que são distribuídos ao longo do degrau final,[3] cujo valor decresce com o aumento de N. Em contrapartida, escadas de Heisenberg com N par não apresentam tais spins de borda. Acreditamos que este resultado ajudará entender mais profundamente a natureza do estado fundamental das escadas de Heisenberg. Vale destacar que os nossos resultados obtidos no estudo das escadas de Heisenberg já foram publicados e podem ser encontrados na referência [40].

Outro problema que abordamos nesta tese foi o comportamento de escala da *entropia de emaranhamento* (entropia de von Neumann) de *escadas quânticas críticas*. Nossos resultados da entropia de emaranhamento são apresentados detalhadamente no capítulo 3 e podem também ser encontrados na referência [41]. Em resumo, neste capítulo, propusemos uma conjectura para as correções de tamanho finito da entropia de emaranhamento de escadas críticas [veja a equação (3.4)]. A fim de verificar nossa conjectura, usamos como sistemas de estudo as: escadas de férmions livres, escadas de Heisenberg e escadas de Ising. Como já mencionado, estamos interessados em escadas críticas. É bem conhecido que escadas de férmions livres são sempre críticas, independentemente do número de pernas. Entretanto, para estudar o regime crítico das escadas quânticas de Ising, tivemos que encontrar o valor do

[3]Os spins de borda das escadas de Heisenberg são similares àqueles encontrados em cadeias de Heisenberg com spins $s > \frac{1}{2}$.

parâmetro crítico $[\lambda_c(N)]$ para cada valor de N. Já para o caso das escadas de Heisenberg, investigamos escadas com sN semi-inteiro. Todos os resultados numéricos da entropia de emaranhamento apresentados no capítulo 3 corroboram com a nossa conjectura, indicando que o prefator do termo logarítmico é universal e está associado com a classe de universalidade das cadeias que compõem as escadas. Para as escadas de férmions livres com preenchimento meio, uma violação da lei entrópica da área é observada. Este resultado está em acordo com a violação da lei da área prevista para modelo de férmions livres em duas dimensões [57, 59, 60, 152]. Em contrapartida, tal violação não é observada para o caso das escadas de Heisenberg e de Ising. Para estas escadas, com condições de contorno abertas, nossos resultados indicam um prefator $1/6$ e $1/12$ para o termo logarítmico da entropia de emaranhamento das escadas de Heisenberg e Ising, respectivamente. Note que este resultado é intrigante, uma vez que no limite das cadeias desacopladas este prefator seria $N/6$. Vale ressaltar que nossa conjectura é válida para o limite de $L \gg N$ e somente quando o subsistema $\mathcal{A}$ está no canto da escada [veja a figura 3.1(b)].

Finalmente, o último tópico que investigamos nesta tese foi o comportamento de *correlações dinâmicas* de *sistemas quânticos unidimensionais*. Esta parte do trabalho foi feita em colaboração com R. G. Pereira e I. S. Eliëns. Assim, no capítulo 4, discutimos a dependência temporal para tempos longos das funções de autocorrelação de spin na borda e no *bulk* de sistemas fortemente correlacionados unidimensionais $\left[C^{\parallel/\perp}_{\text{borda}/bulk}(t)\right]$. Baseados em um modelo efetivo de impureza, dentro do contexto do modelo de líquido de Luttinger não linear, fizemos uma previsão do decaimento assintótico de $C^{\parallel/\perp}_{\text{borda}/bulk}(t)$ para sistemas integráveis e não integráveis. Para o caso integrável, encontramos que as autocorrelações de spin de borda e *bulk* possuem a mesma frequência de oscilação e decaem com uma lei de potência. Ainda para este caso, encontramos uma relação entre os expoentes de decaimento do termo oscilante de $C^{\parallel/\perp}_{\text{borda}/bulk}(t)$ que depende unicamente do parâmetro de Luttinger. Para sistemas não integráveis, encontramos que as autocorrelações de spin no *bulk* e na borda não possuem a mesma frequência de oscilação assim como comportamentos distintos do decaimento da amplitude de oscilação são observados. Enquanto que no *bulk* é previsto decaimento das oscilações com uma lei de potência, na borda estas oscilações decaem exponencialmente. A fim de verificar as previsões mencionadas acima, utilizamos o tDMRG adaptativo. Para o caso integrável, estudamos a cadeia de Heisenberg de spin-$\frac{1}{2}$ e as funções de correlação obtidas estão em perfeito acordo com as previsões da teoria quântica de campos efetiva. Para o caso não integrável, estudamos o modelo de Heisenberg XXZ de spin-1 com anisotropia de íon simples e encontramos evidências do decaimento exponencial para a autocorrelação de borda assim como o deslocamento da frequência de oscilação. As previsões descritas acima não são mantidas para sistemas com grande massa efetiva e sistemas que apresentam estados ligados

no espectro de energia. Uma verificação experimental das autocorrelações de spin em tempo real deve provavelmente envolver a fabricação de um modelo de spins efetivo usando sistemas de átomos frios [5, 6], no qual correlações de spins no espaço real e resolvidas no tempo possam ser medidas usando a técnica de interferometria de Ramsey de muitos corpos [195]. É importante mencionar que os resultados apresentados no capítulo 4 já foram publicados e podem ser encontrados na referência [42].

Como perspectivas futuras, pretendemos investigar propriedades dinâmicas de modelos de spins frustrados, tais como o modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ e a cadeia de Heisenberg zigue-zague com interações de três spins. Sistemas frustrados, em geral, apresentam um rico diagrama de fase com transições de fase governadas por flutuações quânticas. A seguir, descreveremos brevemente nossas motivações para estudar tais sistemas.

O modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ apresenta uma transição de Kosterlitz-Thouless (K-T) de um estado quase-Néel para um estado dimerizado no ponto $J_2/J_1 \approx 0,241$ [196, 197]. Neste ponto, é bem conhecido que correlações estáticas não apresentam correções logarítmicas devido ao cancelamento de acoplamento do operador marginal [196, 197]. Contudo, a dependência das correlações dinâmicas ainda não é clara uma vez que não há previsão para o regime de tempos longos dentro do cone de luz ($x > vt$). Neste contexto, futuramente, pretendemos investigar o comportamento das correções de tempo finito das correlações no ponto de transição (K-T).

Outra motivação no estudo do modelo de Heisenberg $J_1 - J_2$ reside no fato de que recentemente foram encontradas evidências de estado de spin nemático (ESN) no composto $LiCuSbO_4$ [198]. É esperado que uma versão mais geral deste modelo represente um modelo mínimo para estudar tal composto [198]. O ESN é caracterizado pela ausência de uma ordem dipolar espontânea e por uma quebra de simetria de rotação devido à existência de uma ordem escondida. O parâmetro de ordem deste estado é conhecido como ordem quadrupolar dada por $\langle S_i^+ S_{i+1}^+ \rangle$ [199]. Assim, nosso principal objetivo de estudar a fase nemática neste modelo reside no fato de que ela fornece uma versão unidimensional de ordens escondidas de quase-longo-alcance. A proposta de assinatura de estado de spin nemático é a existência de pares de mágnons ligados no espectro do fator de estrutura dinâmico $S(q, \omega)$ em baixas energias [200]. Na fase nemática, é interessante calcular fatores de estrutura dinâmicos de operadores de dois spins, por exemplo $\mathcal{O}_i = S_i^+ S_{i+1}^+$. É importante mencionar que esse tipo de fator de estrutura dinâmico pode ser extraído experimentalmente a partir da técnica de espalhamento inelástico de raio-X ressonante [88]. Neste sentido, pretendemos investigar o fator de estrutura dinâmico na fase nemática usando o tDMRG.

Outro sistema que desejamos estudar é a cadeia de Heisenberg zigue-zague com interações de três spins. Este sistema captura a física de líquido de spin quiral (LSQ) em uma dimensão

[201]. O entendimento de líquidos de spin, em geral, tem sido considerado de grande importância no estudo de sistemas fortemente correlacionados e supercondutores não convencionais [202, 203]. No caso particular da fase LSQ, as excitações coletivas de spins são deconfinadas e exibem propriedades similares às propriedades do efeito Hall quântico fracional, tais como gap de *bulk* e estados de borda topologicamente protegidos [204, 205]. Devido à existência destes estados de borda, o transporte é confinado nas bordas do sistema, enquanto o *bulk* permanece isolante. Neste contexto, pretendemos investigar a existência de estados de borda na cadeia de Heisenberg zigue-zague com interações de três spins.

Por fim, e não menos importante, pretendemos verificar a previsão da teoria quântica de campos efetiva, abordada nesta tese, para os sistemas mencionados acima, uma vez que tais sistemas são integráveis e não integráveis dependendo dos valores de acoplamentos considerados.

Apêndice A

Grupo de Renormalização da matriz de densidade

Neste apêndice apresentaremos o método do grupo de renormalização da matriz de densidade. O surgimento deste método possibilitou o estudo de sistemas grandes, capazes de representar sistemas no limite termodinâmico, através do uso de um critério de escolha de estados que possibilita fazer um truncamento sistemático do espaço de Hilbert. Como já mencionado, uma versão estendida e mais detalhada deste apêndice pode ser encontrada em um trabalho nosso já publicado [83]. Antes de apresentarmos o procedimento de truncagem proposto dentro do DMRG, vamos ilustrar como podemos crescer um sistema de interesse a partir de subsistemas menores.[1] Usaremos como modelo de estudo o modelo de Heisenberg unidimensional de spin-s, com condições de contorno abertas, cuja hamiltoniana é dada por:

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

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 1.1. Rotularemos a 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 A.1, para o caso de $L = 4$.

[1] Tal procedimento também será utilizado no DMRG.

[2] O sistema e o reservatório são construídos previamente quando consideramos a cadeia de tamanho L.

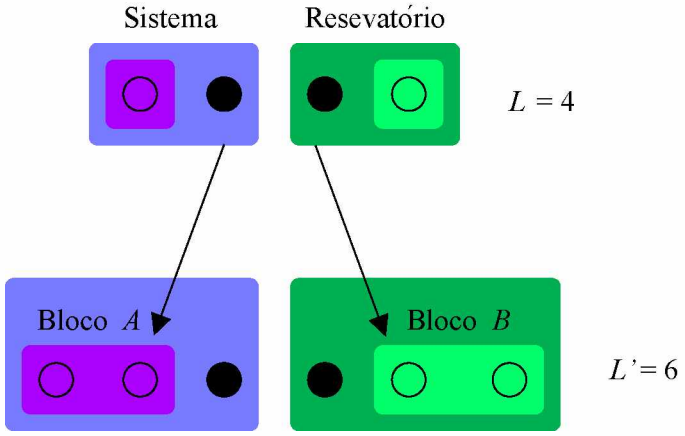


Figura A.1: Representação esquemática do procedimento de crescimento de uma cadeia de tamanho $L = 4$ para uma cadeia com $L' = L + 2$. O bloco A (B) da cadeia de tamanho $L' = 6$ é exatamente o sistema (reservatório) da cadeia de tamanho $L = 4$.

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

Inicialmente, vamos especificar de forma clara como podemos crescer o superbloco em termos dos operadores de spin. Denotaremos como ${}^iH_A$ $[{}^iH_B]$ a hamiltoniana do bloco A $[B]$ e m_A^i $[m_B^i]$ a sua dimensão na i-ésima iteração.[3] 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:

$$
{}^iH_{A\bullet\bullet B} = {}^iH_{A\bullet} \otimes 1_{\text{res}} + 1_{\text{sis}} \otimes {}^iH_{\bullet B} + \Big[1_{\text{A}} \otimes S^z \otimes S^z \otimes 1_B + \\
+ \frac{1}{2}\left(1_A \otimes S^+ \otimes S^- \otimes 1_B + 1_A \otimes S^- \otimes S^+ \otimes 1_B\right)\Big], \tag{A.2}
$$

sendo que 1_{sis} (1_{res}) é a matriz 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:

[3] Embora 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.

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

$$ {}^{i}H_{A\bullet} = {}^{i}H_{A} \otimes 1_{\text{sítio}} + {}^{i}S_{e}^{z} \otimes S^{z} + \frac{1}{2}\left({}^{i}S_{e}^{+} \otimes S^{-} + {}^{i}S_{e}^{-} \otimes S^{+} \right), \tag{A.3} $$

$$ {}^{i}H_{\bullet B} = 1_{\text{sítio}} \otimes {}^{i}H_{B} + S^{z} \otimes {}^{i}S_{d}^{z} + \frac{1}{2}\left(S^{+} \otimes {}^{i}S_{d}^{-} + S^{-} \otimes {}^{i}S_{d}^{+} \right), \tag{A.4} $$

com ${}^{i}H_{A} = {}^{i-1}H_{A\bullet}$ (obtido da iteração anterior). A matriz identidade $1_{\text{sítio}}$ tem dimensão $(2s+1)$. Os operadores que atuam nas bordas dos blocos ${}^{i}S_{e}^{\alpha}/{}^{i}S_{d}^{\alpha}$ ($\alpha = z, \pm$), na i-ésima iteração, são definidos como:[5]

$$ {}^{i}S_{e}^{\alpha} = \underbrace{1_{\text{sítio}} \otimes 1_{\text{sítio}} \otimes \cdots \otimes 1_{\text{sítio}}}_{(i-1)\text{ vezes}} \otimes S^{\alpha}, \tag{A.5} $$

$$ {}^{i}S_{d}^{\alpha} = S^{\alpha} \otimes \underbrace{1_{\text{sítio}} \otimes 1_{\text{sítio}} \otimes \cdots \otimes 1_{\text{sítio}}}_{(i-1)\text{ vezes}}. \tag{A.6} $$

Note que a hamiltoniana do bloco A $[B]$ durante a iteração $i+1$ é igual à hamiltoniana do sistema [reservatório] da iteração i, isto é, ${}^{i+1}H_{A} = {}^{i}H_{A\bullet}$ $[{}^{i+1}H_{B} = {}^{i}H_{\bullet B}]$ com dimensão $m_{A}^{i+1} = m_{A}^{i}(2s+1)$ $\left[m_{B}^{i+1} = m_{B}^{i}(2s+1)\right]$. 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 ideia será considerar apenas $m < m_{A}^{i+1}\left[m' < m_{B}^{i+1}\right]$ 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 ${}^{i}\tilde{O}^{e} = {}^{i}O^{e} \otimes 1_{\text{res}}$ $\left[{}^{i}\tilde{O}^{d} = 1_{\text{sis}} \otimes {}^{i}O^{d}\right]$, associada com o bloco do sistema [reservatório], os autovalores do superbloco na i-ésima iteração ficam inalterados. A hamiltoniana ${}^{i}H_{A}$ e os operadores ${}^{i}S_{e}^{\alpha}$ sujeitos a esta transformação, transformam-se da seguinte forma:

$$ \left({}^{i}\tilde{H}_{A}\right)_{(2s+1)m_{A}^{i},(2S+1)m_{A}^{i}} = {}^{i}O^{e}_{(2S+1)m_{A}^{i},(2S+1)m_{A}^{i}} \left({}^{i-1}H_{A\bullet}\right)_{(2S+1)m_{A}^{i},(2S+1)m_{A}^{i}} {}^{i}O^{e\dagger}_{(2S+1)m_{A}^{i},(2S+1)m_{A}^{i}}, \tag{A.7} $$

e

$$ \left({}^{i}\tilde{S}_{e}^{\alpha}\right)_{(2s+1)m_{A}^{i},(2S+1)m_{A}^{i}} = {}^{i}O^{e}_{(2S+1)m_{A,B}^{i},(2S+1)m_{A}^{i}} \left({}^{i}S_{e}^{\alpha}\right)_{(2S+1)m_{A}^{i},(2S+1)m_{A}^{i}} {}^{i}O^{e\dagger}_{(2S+1)m_{A}^{i},(2S+1)m_{A}^{i}}, \tag{A.8} $$

no qual explicitamos as dimensões das matrizes. Assim, se desejamos considerar apenas alguns estados (ou combinação deles), basta considerarmos ${}^{i}O^{e}$ uma matriz retangular, isto é, ${}^{i}O^{e}_{m,(2s+1)m_{A}^{i}}$, 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 ${}^{i}H_{B}$ e ${}^{i}S_{d}^{\alpha}$.

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

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 descartando alguns/vários estados, a princípio sem nenhum critério, nada garante que ${}^{i+1}H_A \equiv \left({}^{i}\tilde{H}_A\right)_{m,m}$ será bem representado. O cerne do DMRG está exatamente neste ponto.

Com os procedimentos de crescimento e truncagem, mencionados acima, em mente, focaremos agora especificamente no DMRG. A ideia 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:

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij}|i\rangle|j\rangle, \tag{A.9}$$

sendo $|i\rangle$ $[i = 1, \cdots, m_A(2s+1)]$ e $|j\rangle$ $[j = 1, \cdots, m_B(2s+1)]$ 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,

$$|\psi\rangle \approx |\tilde{\psi}\rangle = \sum_{\alpha j} a_{\alpha j}|u_\alpha\rangle|j\rangle. \tag{A.10}$$

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, White [25] mostrou que os estados que devem ser considerados na construção da matriz de transformação O, isto é, que minimiza $\mathcal{S}$, são os autoestados de maior autovalor da matriz de densidade reduzida do sistema, dada por:

$$\rho_{A\bullet} = \mathrm{tr}_{\bullet B}(|\psi\rangle\langle\psi|). \tag{A.11}$$

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. Vale mencionar que uma abordagem pedagógica do DMRG pode ser encontrada nas referências [26, 206].

A.1 Algoritmo infinito

O algoritmo infinito é com certeza a versão do DMRG mais simples de ser implementada e é usado para estimar a energia do estado fundamental por sítio, no limite termodinâmico, do sistema de interesse. Esta versão considera uma cadeia cujo tamanho cresce iterativamente, usualmente $L = 4, 6, 8, \cdots$ (veja a figura A.2), e descarta um número suficiente de estados para que o tamanho do espaço de Hilbert retido seja tratável numericamente. Nós supomos

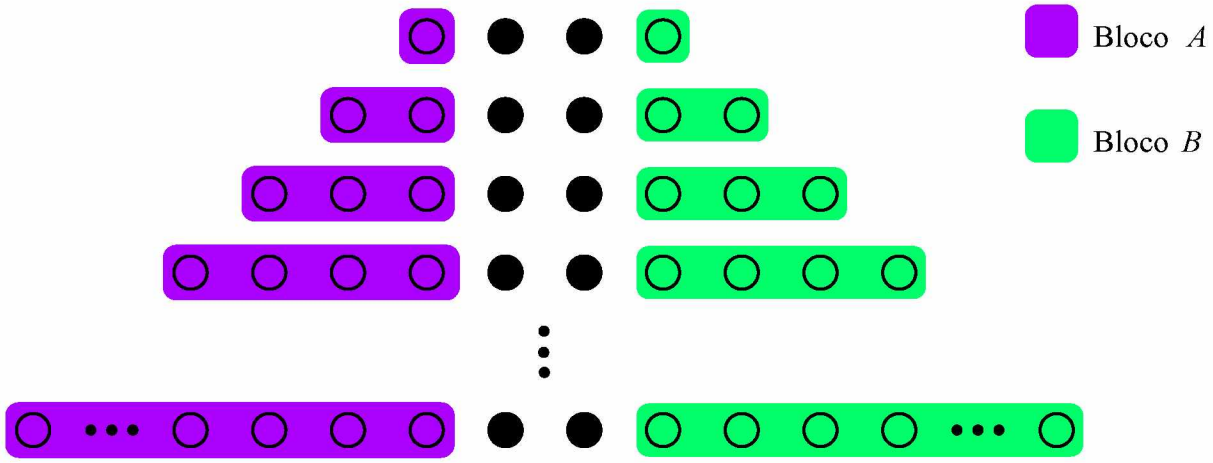


Figura A.2: Representação esquemática do crescimento da cadeia de acordo com o algoritmo infinito.

que os recursos numéricos são suficientes para lidar com um espaço reduzido de estados do bloco de dimensão máxima $m_{\max} \sim 4000$.

Utilizando a técnica de diagonalização numérica de Lanczos [85], diagonalizamos a hamiltoniana do superbloco ($H_{A\bullet\bullet B}$) 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 mais 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 (A.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 (A.11)].

5. Diagonalize $\rho_{A\bullet}$ para encontrar o conjunto dos m autoestados de maiores autovalores ($\{|u_\alpha\rangle\}$).

6. Construa as matrizes ${}^{i}O^{e}$ e ${}^{i}O^{d}$ colocando os m autoestados de $\rho_{A\bullet}$ com maiores autovalores em suas linhas.

7. Construa os operadores ${}^{i}S_{d}^{\alpha}$ e ${}^{i}S_{e}^{\alpha}$ [veja as equações (A.5) e (A.6)].

8. Construa a nova hamiltoniana do bloco A usando como base os m estados retidos, isto é, ${}^{i+1}H_{A} = {}^{i}O^{e}\,({}^{i}H_{A\bullet})^{i}\,O^{e\dagger}$. Havendo reflexão ${}^{i+1}H_{A} = {}^{i+1}H_{B}$.

9. Faça também a transformação de base nos operadores ${}^{i}S_{d}^{\alpha}$ e ${}^{i}S_{e}^{\alpha}$ [veja as equações (A.5) e (A.6)].

10. Volte para o 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:

$$e_0 = \frac{E(L+2) - E(L)}{2}. \tag{A.12}$$

Na medida em 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 erro de truncamento do DMRG, associado com os estados descartados, é dado por:

$$\text{Erro} = 1 - \sum_{i \leq m} w_i = \sum_{i>1}^{m} w_i, \tag{A.13}$$

sendo w_i os autovalores da matriz de densidade reduzida, que supomos estarem em ordem decrescente, e ainda, usamos que $\sum_i w_i = 1$.[7] 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:

[6]Surpreendentemente, 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.

[7]É fácil mostrar que os autovalores $\{w_i\}$ da matriz de densidade têm a seguinte propriedade $\sum_i w_i = 1$. Para maiores detalhes recomendamos o livro *Statistical Mechanics - A Set of Lectures* de R. P. Feynman [207].

$$S_{A\bullet} = -\mathrm{Tr}(\rho_{A\bullet}\log_2\rho_{A\bullet}) = -\sum_i w_i \log_2 w_i. \tag{A.14}$$

Esta entropia é também conhecida como entropia de von Neumann. Podemos notar que quanto maior o número de autoestados da matriz densidade reduzida com autovalores não nulos,[8] 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,[9] 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. Para sistemas críticos (e invariantes conformes) $S_{A\bullet} \sim \log_2\ell$, enquanto que para sistemas não-críticos $S_{A\bullet} \sim \log_2\frac{1}{\Delta}$, sendo Δ o gap do sistema [53, 54, 63, 64, 149, 155]. 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.

A.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 tamanho do reservatório. 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). Fazemos uma representação esquemática da varredura na figura A.3. Note que o tamanho do superbloco é constante durante o processo de varredura. Podemos ver que os blocos do lado direito (reservatórios) são análogos aos blocos construídos no algoritmo infinito. Assim, é conveniente

[8] O número de autoestados da matriz de densidade reduzida com autovalores não nulos é equivalente ao número de estados da decomposição de Schmidt.

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

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 parte da varredura, visto que eles serão úteis no processo iterativo da segunda parte, 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 à ele em cada passo, e diminuindo um sítio do reservatório em cada passo até que o sistema e o reservatório tenham o mesmo tamanho, isto é, ambos tenham $\frac{L}{2}$ sítios[10] (veja figura A.3). 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 [127]. A seguir apresentaremos um algoritmo do DMRG para sistema finito.

Algoritmo finito do DMRG

1. Inicie o processo 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 alcançado[12] (veja a seção A.1). Rotule os blocos pelo seu tamanho i ($i=1,2,\cdots,\frac{L}{2}-1$). A cada iteração armazene a hamiltoniana do bloco do sistema (${}^{i}H_A$), assim como os operadores de borda ${}^{i}S_d^{\alpha}$ e ${}^{i}S_e^{\alpha}$.

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.

4. Armazene a hamiltoniana do bloco A, ${}^{i}H_A$, e os operadores de borda.

[10] É nesta configuração simétrica que em geral são feitas as medidas.
[11] Em alguns casos é conveniente fazer duas ou três iterações para que a energia seja convergida.
[12] O tamanho L é alcançado quando fazemos $(\frac{L}{2}-1)$ iterações do algoritmo de sistema infinito.

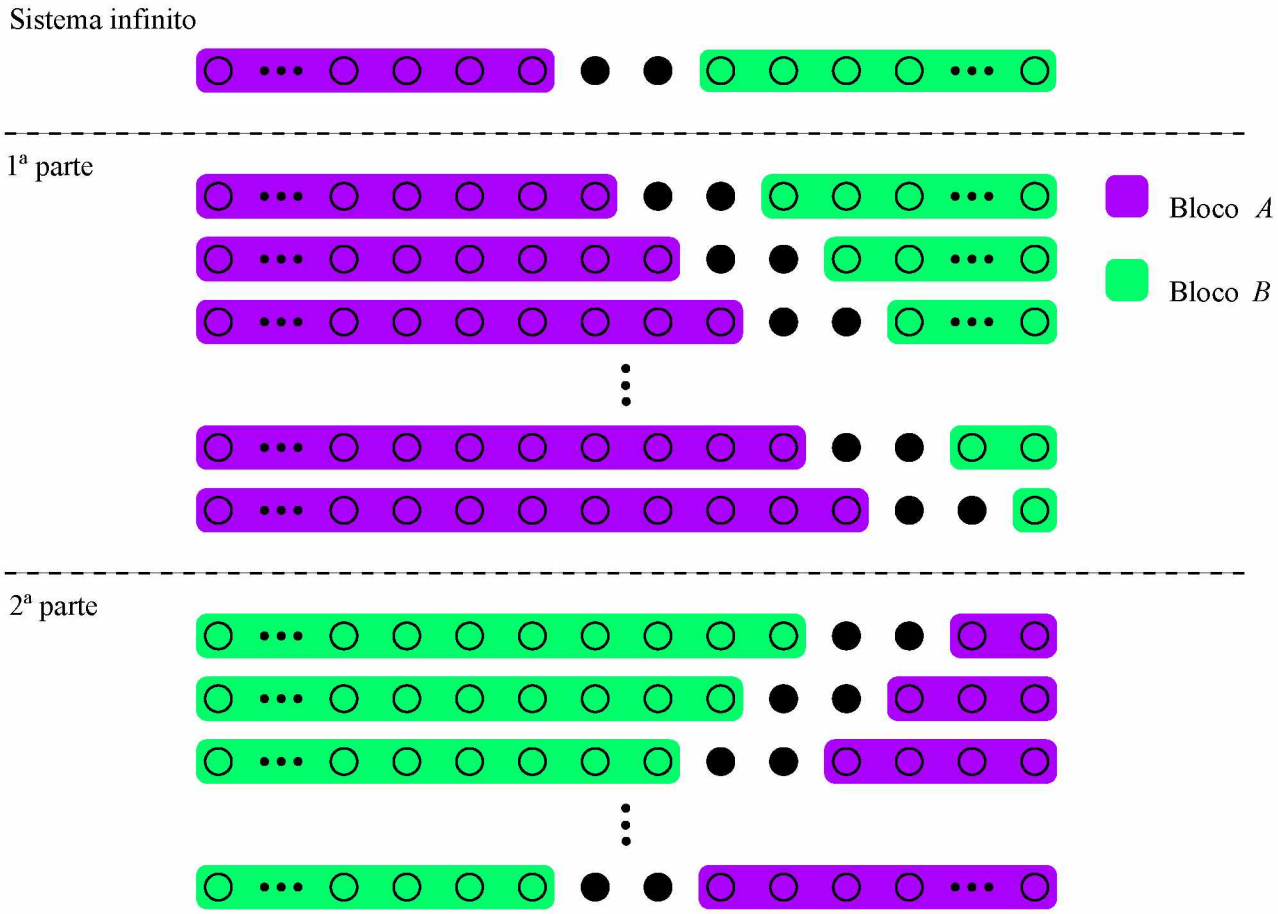


Figura A.3: Representação esquemática de varredura, no algoritmo finito do DMRG.

5. Faça $i \to i+1$, 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 (veja a página 80).

8. Armazene o novo bloco ${}^{i}H_A$, substituindo o antigo.

9. Faça $i \to i+1$, 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.

Expusemos neste apêndice o método do DMRG para cadeias com condições de contorno abertas, mas devemos ressaltar que é possível estudar sistemas com condições de contorno periódicas 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. Note então que, diferentemente do caso de condições abertas, ambos operadores que atuam nas bordas dos blocos do superbloco devem ser construídos. Vale ressaltar também que apesar do DMRG ser uma técnica essencialmente unidimensional, podemos usar esta técnica no estudo de sistemas quase-unidimensionais, como por exemplo sistemas de escadas. Isto se deve ao fato de que um sistema quase-unidimensional pode ser mapeado em um sistema unidimensional com interações de longo alcance. Em particular, no capítulo 2 fazemos uma breve discussão sobre a maneira que podemos estudar sistemas de escadas. Em geral, o esforço computacional é maior para que seja obtida uma boa precisão da energia de sistemas quase-unidimensionais uma vez que o emaranhamento destes sistemas é maior. Por fim, o método do DMRG pode também ser aplicado no estudo de sistemas bidimensionais [84, 93, 95]. Entretanto, o estudo de sistemas $2D$ usando o DMRG é bastante ineficiente uma vez 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].

Apêndice B

Correção de tamanho finito da energia do estado fundamental de escadas de férmions livres

Talvez um dos modelos mais simples de serem estudados em sistemas de muitos corpos é o modelo de férmions livres. A versão unidimensional do modelo é definido pela hamiltoniana

$$\hat{H} = -\sum_{\sigma}\sum_{l}\sum_{j\neq l} t\left(j-l\right)\left[c_{l\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger}c_{l\sigma}\right], \tag{B.1}$$

sendo L o número de sítios do sistema, $c_l^{\dagger}$ (c_l) o operador de criação (aniquilação) de um férmion no sítio l com projeção de spin σ e $t\left(j-l\right)$ o parâmetro de *hopping*. A fim de escrever a hamiltoniana (B.1) com condições de contorno periódicas no espaço de momento, usaremos o fato de que

$$c_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_{k} e^{ikj}c_{k\sigma}. \tag{B.2}$$

Desse modo, a equação (B.1) pode ser escrita como:

$$\hat{H} = -\sum_{k,k',\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger}c_{k'\sigma}\sum_{l=1}^{L}\sum_{j\neq l}\left[\frac{t\left(j-l\right)}{L}\left(e^{-ikl}e^{ik'j} + \text{h.c.}\right)\right]. \tag{B.3}$$

No caso de condições de contorno periódicas (abertas), os valores possíveis de k são $k = \frac{2\pi n}{L}$ $\left(k = \frac{\pi n}{L+1}\right)$. A variável n é um número inteiro e seu valor depende do tamanho da cadeia (L) e da condição de contorno considerada. Se estamos interessados somente na contribuição de *hopping* entre vizinhos mais próximos, o parâmetro $t\left(j-l\right)$ é reduzido a

$$t\left(j-l\right) = \begin{cases} t & \text{se } |j-l| = 1 \\ 0 & \text{demais casos} \end{cases}. \tag{B.4}$$

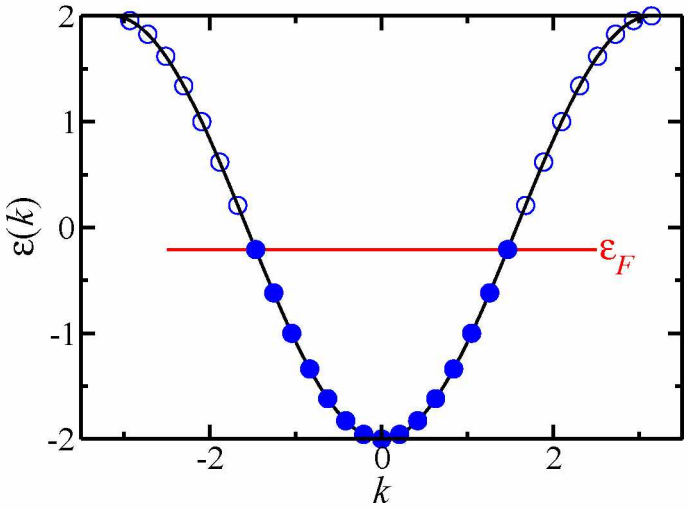


Figura B.1: Relação de dispersão de uma cadeia de férmions livres com $L = 30$ e condições de contorno periódicas. Os círculos preenchidos (abertos) representam estados ocupados (desocupados) do sistema.

Definindo $A = \sum_{l,j\neq l}\left[\frac{t(j-l)}{L}\left(e^{-ikl}e^{ik'j}\right)\right]$ e fazendo uma transformada de Fourier no parâmetro de *hopping*, podemos escrever A da seguinte forma:

$$A = te^{-ik}\delta_{k,k'}. \tag{B.5}$$

Dessa forma, a hamiltoniana (B.3) será dada por:

$$\hat{H} = -\sum_{k,k',\sigma} t\left(c^{\dagger}_{k\sigma}c_{k'\sigma}e^{-ik}\delta_{k,k'} + \text{h.c.}\right) = -\sum_{k\sigma} 2t\cos(k)c^{\dagger}_{k\sigma}c_{k\sigma} = \sum_{k\sigma}\varepsilon(k)c^{\dagger}_{k\sigma}c_{k\sigma}, \tag{B.6}$$

sendo $\varepsilon(k) = -2t\cos(k)$ a relação de dispersão do modelo de férmions livres unidimensional.

O estado fundamental da cadeia de fémions livres pode ser obtido preenchendo todos os N_F níveis de mais baixa energia, sendo N_F o número de partículas associado a este estado (veja figura B.1). Note que N_F nada mais é do que o número de níveis de energia com energia menor ou igual a zero. Desse modo, a energia do estado fundamental E_0 é obtida somando todas as energias dos níveis ocupados na relação de dispersão da cadeia. A energia associada ao nível mais alto ocupado é conhecida como nível de Fermi (ε_F).

Para o caso de escadas de N pernas de férmions livres, o procedimento para o cálculo da relação de dispersão é análogo ao caso unidimensional e a hamiltoniana é escrita como:

$$\hat{H} = \sum_{k_x,k_y,\sigma}\varepsilon(k_x,k_y)c^{\dagger}_{k_x,k_y,\sigma}c_{k_x,k_y,\sigma}, \tag{B.7}$$

sendo $\varepsilon(k_x,k_y) = -2t\left[\cos(k_x) + \cos(k_y)\right]$ a relação de dispersão do sistema. Podemos perceber então que escadas de férmions livres de N pernas possuem N ramos na relação de dispersão.

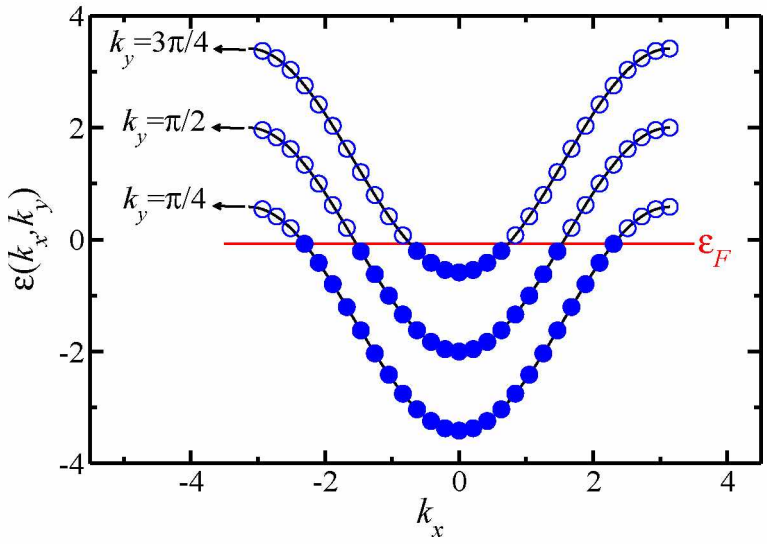


Figura B.2: Relação de dispersão de uma escada de férmions livres de tamanho 3×30 com condições de contorno periódicas (abertas) ao longo das cadeias (degraus). Os círculos preenchidos (abertos) representam estados ocupados (desocupados) do sistema.

A fim de ilustrar $\varepsilon(k_x, k_y)$, mostramos na figura B.2 a relação de dispersão de uma escada de férmions livres de tamanho 3×30 com condições de contorno periódicas (abertas) ao longo das cadeias (degraus). Note que, para uma dada energia, o número de níveis preenchidos de cada ramo da relação de dispersão é diferente (veja por exemplo a figura B.2). Assim, a energia do estado fundamental é dada por:

$$E_0(N,L) = -\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=-n_j}^{n_j} 4t\left[\cos\left(\frac{2\pi i}{L}\right) + \cos\left(\frac{\pi j}{N+1}\right)\right], \tag{B.8}$$

sendo N o número de pernas e n_j o número de níveis preenchidos no ramo j da relação de dispersão. Podemos reescrever a equação (B.8) da seguinte forma:

$$E_0(N,L) = -4t\sum_{j=1}^{N}\left[\sum_{i=-nj}^{nj}\cos\left(\frac{2\pi i}{L}\right)\right] - 4t\sum_{j=1}^{N}\left[\cos\left(\frac{\pi j}{N+1}\right)(2n_j+1)\right]. \tag{B.9}$$

A fim de determinar a dependência de $E_0(N,L)$ com o número de pernas, usaremos a fórmula de Euler-Maclaurin [208] dada por:

$$\sum_{t=a}^{b} f\left(\frac{t}{M}\right) = M\int_a^b f(x)dx + \frac{1}{2}\left[f\left(\frac{a}{M}\right) + f\left(\frac{b}{M}\right)\right] + O\left(\frac{1}{M}\right). \tag{B.10}$$

Assim, utilizando a equação (B.10) para reescrever o termo $\sum_{i=-nj}^{nj}\cos\left(\frac{2\pi i}{L}\right)$, temos:

$$\sum_{i=-nj}^{nj} \cos\left(\frac{2\pi i}{L}\right) = \frac{L}{\pi}\text{sen}\left(\frac{2\pi n_j}{L}\right) + \cos\left(\frac{2\pi n_j}{L}\right) + O\left(\frac{1}{L}\right). \tag{B.11}$$

Se assumirmos que $L \gg N \gg 1$ é fácil mostrar que, para o estado fundamental, o número de níveis ocupados no ramo j é dado por:

$$n_j = \frac{L}{2(N+1)}(N-j+1). \tag{B.12}$$

Usando as equações (B.11) e (B.12) e fazendo o limite de $L \to \infty$, podemos reescrever a equação (B.9) da seguinte forma:

$$\lim_{L\to\infty} \frac{E_0(N,L)}{L} = -4t \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{1}{\pi}\text{sen}\left(\frac{N-j+1}{N+1}\right) + \frac{N-j+1}{N+1}\cos\left(\frac{j\pi}{N+1}\right)\right]. \tag{B.13}$$

Utilizando novamente a fórmula de Euler-Maclaurin [veja a equação (B.10)] obtemos que:

$$\lim_{L\to\infty} \frac{E_0(N,L)}{L} = -4t(N+1)\left\{\left[\frac{2}{\pi^2} + \frac{N}{2(N+1)^2}\right]\cos\left(\frac{\pi}{N+1}\right) - \left[\frac{2}{\pi^2} - \frac{1}{2(N+1)^2}\right]\cos\left(\frac{N\pi}{N+1}\right) + \right.$$

$$\left. + \frac{3}{2\pi(N+1)}\text{sen}\left(\frac{N\pi}{N+1}\right) + \frac{1-2N}{2\pi(N+1)}\text{sen}\left(\frac{\pi}{N+1}\right)\right\}. \tag{B.14}$$

Por fim, expandindo a equação (B.14) em série de Taylor até a segunda ordem de N, encontramos que:

$$\lim_{L\to\infty} \frac{E_0(N,L)}{NL} = -\frac{16t}{\pi^2} + \left(2 - \frac{16}{\pi^2}\right)\frac{1}{N}. \tag{B.15}$$

Podemos ver então que a energia do estado fundamental por sítio das escadas de férmions livres possui uma correção de tamanho finito que em primeira ordem escala com $\frac{1}{N}$. Note que no caso do limite termodinâmico do modelo bidimensional ($N \to \infty$) a energia do estado fundamental por sítio é $-\frac{16t}{\pi^2}$.

Apêndice C

Método da matriz de correlação

Neste apêndice apresentaremos sucintamente o método da matriz de correlação. Este método é usado para calcular a entropia de emaranhamento (EE) de um sistema bipartido descrito por uma hamiltoniana biquadrática. Neste contexto, considere que o sistema de férmions livres é composto de dois subsistemas $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ compostos por x e $L-x$ sítios,[1] respectivamente. Como já mencionado, a entropia de emaranhamento destes subsistemas é definida como $S_{\mathcal{A}} = -\mathrm{Tr}\rho_{\mathcal{A}} \ln \rho_{\mathcal{A}}$. Podemos observar que uma forma de determinar a EE é diagonalizando a matriz de densidade reduzida associada ao subsistema $\mathcal{A}$ ($\rho_{\mathcal{A}}$). Entretanto, para o caso de modelos descritos por hamiltonianas biquadráticas, é possível determinar a EE através da matriz de correlação C, cujos elementos são $C_{x_1,x_2} = \langle c^{\dagger}_{x_1} c_{x_2} \rangle$. A seguir, discutiremos como C e $\rho_{\mathcal{A}}$ estão relacionadas.

Um estado $|\psi\rangle$ de um sistema bipartido pode ser escrito como $|\psi\rangle = \sum_{\alpha,\beta} a_{\alpha,\beta} |\alpha\rangle|\beta\rangle$, sendo $\{|\alpha\rangle\}$ e $\{|\beta\rangle\}$ o conjunto de estados que representam os subsistemas $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$, respectivamente. Assim, podemos escrever as correlações C_{x_1,x_2} do subsistema $\mathcal{A}$ (isto é, para $x_1, x_2 \leq x$) da seguinte forma:

$$C_{x_1,x_2} = \sum_{\alpha,\alpha'} \left[\left(\sum_{\beta} a_{\alpha,\beta} a^{*}_{\alpha',\beta} \right) \langle \alpha' | c^{\dagger}_{x_1} c_{x_2} | \alpha \rangle \right]. \tag{C.1}$$

Identificando o termo $\sum_{\beta} a_{\alpha,\beta} a^{*}_{\alpha',\beta}$ como o elemento da matriz de densidade reduzida $(\rho_{\mathcal{A}})_{\alpha,\alpha'}$, temos que:[2]

$$C_{x_1,x_2} = \sum_{\alpha} \left(\rho_{\mathcal{A}} c^{\dagger}_{x_1} c_{x_2} \right)_{\alpha,\alpha} = \mathrm{Tr} \left(\rho_{\mathcal{A}} c^{\dagger}_{x_1} c_{x_2} \right). \tag{C.2}$$

Desse modo, podemos notar que a matriz de correlação C_{x_1,x_2} está relacionada com $\rho_{\mathcal{A}}$ pela equação (C.2). Assim, para determinarmos $\rho_{\mathcal{A}}$ a partir de C_{x_1,x_2} é necessário inverter esta

[1] Veja a figura 3.1 para uma visualização destes subsistemas. Nesta figura, os x ($L-x$) sítios que estão sobre a área roxa (azul) pertencem ao subsistema $\mathcal{A}$ ($\mathcal{B}$).

[2] Uma revisão detalhada de matriz de densidade pode ser encontrada na referência [207].

equação. É fácil notar que a matriz C é hermitiana, portanto ela pode ser diagonalizada por uma transformação unitária P, tal que:

$$D = P^{\dagger}CP, \tag{C.3}$$

sendo D uma matriz diagonal cujos elementos são os autovalores de C. Denotaremos como $\{w_m\}$ o conjunto de autovalores da matriz de correlação. Logo, podemos perceber que:

$$\left(P^{\dagger}CP\right)_{m,n} = \sum_{x_1,x_2} \left(P^{\dagger}\right)_{m,x_1} \langle c^{\dagger}_{x_1} c_{x_2}\rangle P_{x_2,n} = w_m \delta_{m,n}. \tag{C.4}$$

Definindo $g_n = \sum_{x_2} c_{x_2} P_{x_2,n}$, temos que:

$$\langle g^{\dagger}_m g_n\rangle = w_m \delta_{m,n}. \tag{C.5}$$

Por outro lado, é fácil ver que $\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle = \mathrm{Tr}\left(\rho_{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{O}}\right)$ para qualquer operador $\hat{\mathcal{O}}$ que atua somente no subsistema $\mathcal{A}$. Portanto,

$$\langle g^{\dagger}_m g_n\rangle = \mathrm{Tr}\left(\rho_{\mathcal{A}} g^{\dagger}_m g_n\right). \tag{C.6}$$

Usando o fato de que a matriz de densidade $\rho_{\mathcal{A}}$ é não correlacionada na base em que a matriz de correlação é diagonal [209], podemos escrever:

$$\rho_{\mathcal{A}} = \varrho_1 \otimes \varrho_2 \otimes \cdots \otimes \varrho_x. \tag{C.7}$$

sendo ϱ_i a matriz de densidade de uma partícula, associada ao férmion no i-ésimo sítio de $\mathcal{A}$. Logo, sabendo que $\mathrm{Tr}\varrho_i = 1$ e fazendo $m = n$, temos:

$$\langle g^{\dagger}_m g_m\rangle = \mathrm{Tr}\left(\varrho_m g^{\dagger}_m g_m\right) = w_m.$$

Note que podemos expressar matricialmente os operadores g_m, $g^{\dagger}_m$ e ϱ_m da seguinte forma:

$$g_m = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad g^{\dagger}_m = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{C.8}$$

e

$$\varrho_m = \begin{pmatrix} \alpha_m & \beta_m \\ \beta^*_m & 1-\alpha_m \end{pmatrix}, \tag{C.9}$$

sendo α_m e β_m elementos da matriz ϱ_m. Calculando $\langle g_m\rangle$ é fácil ver que $\beta_m = 0$. Desse modo,

$$w_m = \mathrm{Tr}\left(\varrho_m g^{\dagger}_m g_m\right) = \mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_m & 0 \\ 0 & 1-\alpha_m \end{pmatrix}\right] = \alpha_m. \tag{C.10}$$

Por fim, usando equação (C.7) é fácil mostrar que:

$$S_{\mathcal{A}} = -\sum_{m=1}^{x} \left[w_m \ln\left(w_m\right) - \left(1-w_m\right)\ln\left(1-w_m\right)\right]. \tag{C.11}$$

Assim, podemos observar na equação acima que a entropia de emaranhamento pode ser determinada em termos dos autovalores da matriz C. É importante observar que a vantagem de usar o método da matriz de correlação para determinar $S_{\mathcal{A}}$ reside no fato de que é necessário a diagonalização da matriz de correlação de ordem $x \times x$. Em contrapartida, este problema se torna bem mais complicado se quisermos determinar $S_{\mathcal{A}}$ em termos dos autovalores da matriz de densidade reduzida de um subsistema de tamanho x, pois é necessário que uma matriz de ordem $2^x \times 2^x$ ($\rho_{\mathcal{A}}$) seja diagonalizada. Uma revisão mais detalhada sobre o método da matriz de correlação pode ser encontrada nas referências [209, 210].

Referências Bibliográficas

[1] C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU, F. LALOË, *Quantum Mechanics*, vol. 2, Willey.

[2] F. N. Mott, R. Peierls, *Discussion of the paper by de Boer and Verwey, Proceedings of the Physical Society of London* **49**, 72 (1937).

[3] 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).

[4] 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).

[5] I. Bloch, J. Dalibard, S. Nascimbène, *Quantum simulations with ultracold quantum gases, Nature Physics* **8**, 267 (2012).

[6] I. Bloch, *Ultracold quantum gases in optical lattices, Nature Physics* **1**, 23 (2005).

[7] D. Jaksch, P. Zoller, *The cold atom Hubbard toolbox, Annals of Physics* **315**, 1 (2005).

[8] A. H. Russell, P. M. Duarte, T.-L. Yang, X. Liu, T. Paiva, E. Khatami, R. T. Scalettar, N. Trivedi, D. A. Huse, R. G. Hulet, *Observation of antiferromagnetic correlations in the Hubbard model with ultracold atoms* **519**, 211 (2015).

[9] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Graduate Texts in Contemporary Physics, Spring-Verlag, Berlin (1994).

[10] E. Dagotto, T. M. Rice, *Surprises on the way from one- to two- dimensional quantum magnets: The ladders materials, Science* **271**, 618 (1996).

[11] E. Dagotto, *Nanoscale Phase Separation and Colossal Magneto-resistance*, Spring-Verlag, Berlin (2002).

[12] H. Bethe, *On the theory of metals, I. eigenvalues and eigenfunctions of a linear chain of atoms, Z. Phys.* **71**, 205 (1931).

[13] P. Jordan, E. Wigner, *Über das Paulische Äquivalenzverbot, Z. Phys.* **47**, 631 (1928).

[14] J. M. Luttinger, *An exactly soluble model of a many-fermion system, J. Math. Phys.* **4**, 1154 (1963).

[15] D. C. Mattis, E. H. Lieb, *Exact solution of a many-fermion system and its associated boson field, J. Math. Phys.* **6**, 304 (1965).

[16] A. Luther, I. Peschel, *Single-particle states, Kohn anomaly, and pairing fluctuations in 1 dimension, Phys. Rev. B* **9**, 2911 (1974).

[17] 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).

[18] D. C. Mattis, *New wave-operator identity applied to the study of a persistent currents in 1D, J. Math. Phys.* **15**, 609 (1974).

[19] R. Heidenreich, R. Seiler, A. Uhlenbrock, *The Luttinger model, J. Stat. Phys.* **22**, 27 (1980).

[20] 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).

[21] F. D. M. Haldane, *General Relation of Correlation Exponents and Spectral Properties of One-Dimensional Fermi Systems: Application to the Anisotropic S=1 / 2 Heisenberg Chain, Phys. Rev. Lett.* **45**, 16, 1358 (1980).

[22] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press (1982).

[23] E. Dagotto, *Correlated electrons in high-temperature superconductors, Rev. Mod. Phys,* **66**, 763 (1994).

[24] S. R. White, *Density matrix formulation for quantum renormalization groups, Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).

[25] S. R. White, *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups, Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).

[26] A. L. Malvezzi, *An Introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems, Brazilian Journal Physics* **33**, 55 (2003).

[27] K. Hallberg, *New trends in Density Matrix Renormalization, Advances in Physics* **55**, 477 (2006).

[28] R. R. Santos, *Introduction to Quantum Monte Carlo Simulations for fermionic systems, Brazilian Journal Physics* **33**, 36 (2003).

[29] W. von der Linden, *A Quantum Monte Carlo approach to many-body physics, Phys. Rep.* **220**, 53 (1992).

[30] M. A. Cazalilla, J. B. Marston, *Time-Dependent Density-Matrix Renormalization Group: A Systematic Method for the Study of Quantum Many-Body Out-of-Equilibrium Systems, Phys. Rev. Lett.* **88**, 256403 (2002).

[31] H. G. Luo, T. Xiang, X. Q. Wang, *Comment on Time-Dependent Density-Matrix Renormalization Group: A Systematic Method for the Study of Quantum Many-Body Out-of-Equilibrium Systems, Phys. Rev. Lett.* **91**, 049701 (2003).

[32] A. E. Feiguin, *The Density Matrix Renormalization Group and its time-dependent variants, AIP Conference Proceedings* **1419**, 5 (2011).

[33] A. E. Feiguin, S. R. White, *Time-step targeting methods for real-time dynamics using the density matrix renormalization group, Phys. Rev. B* **72**, 020404 (2005).

[34] E. Jeckelmann, *Dynamical density-matrix renormalization-group method, Phys. Rev. B* **66**, 045114 (2002).

[35] K. A. Hallberg, *Density-matrix algorithm for the calculation of dynamical properties of low-dimensional systems, Phys. Rev. B* **52**, R9827 (1995).

[36] S. K. Pati, S. Ramasesha, Z. Shuai, J. L. Brédas, *Dynamical nonlinear optical coefficients from the symmetrized density-matrix renormalization-group method, Phys. Rev. B* **59**, 14827 (1999).

[37] T. D. Kühner, S. R. White, *Dynamical correlation functions using the density matrix renormalization group, Phys. Rev. B* **60**, 335 (1999).

[38] P. Schmitteckert, *Nonequilibrium electron transport using the density matrix renormalization group method, Phys. Rev. B* **70**, 121302 (2004).

[39] F. Verstraete, J. J. García-Ripoll, J. I. Cirac, *Matrix Product Density Operators: Simulation of Finite-Temperature and Dissipative Systems, Phys. Rev. Lett.* **94**, 207204 (2004).

[40] F. B. Ramos, J. C. Xavier, *N-leg spin-S Heisenberg ladders: A density-matrix renormalization group study*, *Phys. Rev. B* **89**, 094424 (2014).

[41] J. C. Xavier, F. B. Ramos, *Universal finite-size corrections of the entanglement entropy of quantum ladders and the entropic area law*, *J. Stat. Mech.* P10034 (2014).

[42] S. Eliëns, F. B. Ramos, R. G. Pereira, J. C. Xavier, *Boundary versus bulk behavior of time-dependent correlation functions in one-dimensional quantum systems*, *Phys. Rev. B* **93**, 195129 (2016).

[43] V. V. Moshchalkov, J. Vanacken, L. Trappeniers, *Phase diagram of high-Tc cuprates: Stripes, pseudogap, and effective dimensionality*, *Phys. Rev. B* **64**, 214504 (2001).

[44] E. Dagotto, J. Riera, D. Scalapino, *Superconductivity in ladders and coupled planes*, *Phys. Rev. B* **45**, 5744 (1992).

[45] 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).

[46] M. Brune, F. Schmidt-Kaler, A. Maali, J. Dreyer, E. Hagley, J. M. Raimond, S. Haroche, *Quantum Rabi Oscillation: A Direct Test of Field Quantization in a Cavity*, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1800 (1996).

[47] M. Brune, E. Hagley, J. Dreyer, X. Maître, A. Maali, C. Wunderlich, J. M. Raimond, S. Haroche, *Observing the Progressive Decoherence of the "Meter"in a Quantum Measurement*, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4887 (1996).

[48] J. C. Bergquist, R. G. Hulet, W. M. Itano, D. J. Wineland, *Observation of Quantum Jumps in a Single Atom*, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1699 (1986).

[49] C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano, D. J. Wineland, *Phys. Rev. Lett.*, *Demonstration of a Fundamental Quantum Logic Gate* **75**, 4714 (1995).

[50] A. Amico, R. Fazio, Osterloh, V. Vedral, *Entanglement in many-body systems*, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).

[51] A.A. Belavin, A.M. Polyakov, A.B. Zamolodchikov, *Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory*, *Nucl. Phys. B* **241**, 333 (1984).

[52] H. E. Stanley, *Introduction to phase transitions and critical phenomena*, Oxford University Press, Londres (1971).

[53] J. Eisert, M. Cramer, M. B. Plenio, *Colloquium: Area laws for the entanglement entropy*, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 277 (2010).

[54] P. Calabrese, J. Cardy, *Entanglement entropy and quantum field theory*, *J. Stat. Mech.* P06002 (2004).

[55] W. Li, L. Ding, R. Yu, T. Roscilde, S. Haas, *Scaling behavior of entanglement in two- and three-dimensional free-fermion systems*, *Phys. Rev. B* **74**, 7, 073103 (2006).

[56] T. Barthel, M.-C. Chung, U. Schollwöck, *Entanglement scaling in critical two-dimensional fermionic and bosonic systems*, *Phys. Rev. A* **74**, 2, 022329 (2006).

[57] A. B. Kallin, M. B. Hastings, R. G. Melko, R. R. P. Singh, *Anomalies in the entanglement properties of the square-lattice Heisenberg model*, *Phys. Rev. B* **84**, 165134 (2011).

[58] H. F. Song, N. Laflorencie, S. Rachel, K. Le Hur, *Entanglement entropy of the two-dimensional Heisenberg antiferromagnet*, *Phys. Rev. B* **83**, 224410 (2011).

[59] M. M. Wolf, *Violation of the entropic area law for fermions*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 1, 010404 (2006).

[60] D. Gioev, I. Klich, *Entanglement entropy of fermions in any dimension and the widom conjecture*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 10, 100503 (2006).

[61] L. Ding, N. Bray-Ali, R. Yu, S. Haas, *Subarea law of entanglement in nodal fermionic systems*, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 21, 215701 (2008).

[62] B. Swingle, *Entanglement entropy and the fermi surface*, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 5, 050502 (2010).

[63] C. Holzhey, F. Larsen, F. Wilczek, *Geometric and renormalized entropy in conformal field theory*, *Nucl. Phys.* **B424**, 443 (1994).

[64] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, A. Kitaev, *Entanglement in Quantum Critical Phenomena*, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).

[65] F. C. Alcaraz, M. S. Sarandy, *Finite-size corrections to entanglement in quantum critical systems*, *Phys. Rev. A* **78**, 032319 (2008).

[66] P. Francesco, P. Mathieu, D. Sénéchal, *Conformal Field Theory*, Springer, Berlin (1997).

[67] L. D. Landau, *The theory of a Fermi liquid, Sov. Physics JETP* **3**, 920 (1957).

[68] L. D. Landau, *Oscillations in a Fermi liquid, Sov. Phys. JETP* **5**, 101 (1957).

[69] L. D. Landau, *On the theory of the Fermi liquid, Sov. Phys. JETP* **8**, 70 (1959).

[70] V. J. Emery, *Theory of the One-Dimensional Electron Gas*, in J. T. Devreese, R. P. Evrard, V. E. van Doren (Eds.) *Highly Conducting One-Dimensional Solids*, chap. 6, 247–303, Plenum, New York (1979).

[71] J. Sólyom, *The Fermi gas model of one-dimensional conductors, Adv. Phys.* **28**, 201 (1979).

[72] J. Voit, *One-dimensional fermi liquids, Rep. Prog. Phys.* **58**, 9, 977 (1995).

[73] J. von Delft, H. Schoeller, *Bosonization for beginners - refermionization for experts, Ann. Phys. (Leipzig)* **7**, 4, 225 (1998). Cond-mat/9805275v3.

[74] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, A. M. Tsvelik, *Bosonization and Strongly Correlated System*, Cambridge University Press (1998).

[75] T. Giamarchi, *Quantum physics in one dimension*, Oxford University Press, Oxford (2004).

[76] M. Pustilnik, M. Khodas, A. Kamenev, L. I. Glazman, *Dynamic Response of One-Dimensional Interacting Fermions, Phys. Rev. Lett.* **96**, 196405 (2006).

[77] R. G. Pereira, J. Sirker, J.-S. Caux, R. Hagemans, J. M. Maillet, S. R. White, I. Affleck, *Dynamical Spin Structure Factor for the Anisotropic Spin-1/2 Heisenberg Chain, Phys. Rev. Lett.* **96**, 257202 (2006).

[78] K. G. Wilson, *Renormalization group - critical phenomena and Kondo problem, Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).

[79] U. Schollwöck, *The density-matrix renormalization group, Rev. Mod. Phys.* **77**, 259 (2005).

[80] K. Hallberg, *New Trends in Density Matrix Renormalization, Adv. Phys.* **55**, 477 (2006).

[81] S. R. White, A. E. Feiguin, *Real-Time Evolution Using the Density Matrix Renormalization Group, Phys. Rev. Lett.* **93**, 076401 (2004).

[82] A. J. Daley, C. Kollath, U. Schollwöck, G. Vidal, *Time-dependent density-matrix renormalization-group using adaptive effective Hilbert spaces*, *J. Stat. Mech.:Theory and Experiment* **2004**, P04005 (2004).

[83] F. B. Ramos, *As escadas de Heisenberg de N pernas*, Master's thesis, Universidade Federal de Uberlândia (2013).

[84] S. R. White, *Spin Gaps in a Frustrated Heisenberg Model for* CaV_4O_9, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3633 (1996).

[85] 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).

[86] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley Plubishing Company (1994).

[87] M. Mourigal, M. Enderle, A. Klöpperpieper, J.-S. Caux, A. Stunault, H. M. Rønnow, *Fractional spinon excitations in the quantum Heisenberg antiferromagnetic chain*, *Nature Physics* **9**, 435 (2013).

[88] L. Savary, T. Senthil, *Probing Hidden Orders with Resonant Inelastic X-Ray Scattering*, *arxiv.org/abs/1506.04752* (2015).

[89] E. Hairer, C. Lubich, M. Roche, *The Numerical Solution of Differential-Algebraic Systems by Runge-Kutta Methods*, Springer (1989).

[90] C. Moler, C. Van Loan, *Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later*, *SIAM REVIEW* **45**, 3 (2003).

[91] G. Vidal, *Efficient Classical Simulation of Slightly Entangled Quantum Computations*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 147902 (2003).

[92] N. Hatano, M. Suzuki, *Finding exponential product formulas of higher orders*, *Lect. Notes Phys.* **679**, 37 (2005).

[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, R. M. Noack, D. J. Scalapino, *Resonating valence-bond theory of coupled Heisenberg-chains*, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 886 (1994).

[95] P. Henelius, *Two dimensional infinite-system density-matrix renormalization group algorithm*, *Phys. Rev. B* **60**, 9561 (1999).

[96] T. Xiang, J. Lou, Z. Su, *Two-dimensional algorithm of the density-matrix renormalization group*, *Phys. Rev. B* **64**, 104414 (2001).

[97] J. C. Xavier, *Spin and charge gaps of the half-filled N-leg Kondo Ladders*, *Phys. Rev. B* **68**, 134422 (2003).

[98] D. J. J. Farnell, *Density matrix renormalization group calculations for two-dimensional lattices: Application to the spin-half and spin-one square-lattice Heisenberg models*, *Phys. Rev. B* **68**, 134419 (2003).

[99] J. Zhao, X. Wang, T. Xiang, Z. Su, L. Yu, J. Lou, C. Chen, *Antiferromagnetic Heisenberg ladders in staggered magnetic field*, *Phys. Rev. B* **73,**, 012411 (2006).

[100] S. Nishimoto, M. Arikawa, *Low-lying excitations of the three-leg spin tube: A density-matrix renormalization group study*, *Phys. Rev. B* **78**, 054421 (2008).

[101] D. Charrier, S. Capponi, M. Oshikawa, P. Pujol, *Quantum phase transitions in three-leg spin tubes*, *Phys. Rev. B* **82**, 075108 (2010).

[102] E. M. Stoudenmire, S. R. White, *Studying Two-Dimensional Systems with the Density Matrix Renormalization Group*, *Annu. Rev. Cond. Matt. Phys.* **3**, 111 (2012).

[103] S. Capponi, P. Lecheminant, M. Moliner, *Quantum phase transitions in multileg spin ladders with ring exchange*, *Phys. Rev. B* **88**, 075132 (2013).

[104] S. Nishimoto, N. Shibata, C. Hotta, *Controlling frustrated liquids and solids with an applied field in a kagome Heisenberg antiferromagnet*, *Nat. Commun.* **4**, 2287 (2013).

[105] F. Verstraete, J. I. Cirac, *Renormalization algorithms for Quantum-Many Body Systems in two and higher dimensions*, *http://arxiv.org/abs/cond-mat/0407066* (2004).

[106] G. Vidal, *Class of Quantum Many-Body States That Can Be Efficiently Simulated*, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 110501 (2008).

[107] F. D. M. Haldane, *Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the O(3) nonlinear sigma model*, *Phys. Lett. A* **93**, 464 (1983).

[108] 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).

[109] D. Sénéchal, *Semiclassical description of spin ladders*, *Phys. Rev. B* **52**, 15319 (1995).

[110] G. Sierra, *The nonlinear sigma model and spin ladders*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 3299 (1996).

[111] E. Dagotto, *Experiments on ladders reveal a complex interplay a between a spin-gapped normal state and superconductivity*, *Rep. Prog. Phys.* **62**, 1525 (1999).

[112] A. Moreo, *Ground-state properties of Heisenberg spin chains*, *Phys. Rev. B* **35**, 8562 (1987).

[113] S. Liang, *Monte Carlo calculations of the correlation functions for Heisenberg spin chains at T=0*, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1597 (1990).

[114] F. C. Alcaraz, A. Moreo, *Critical behavior of anisotropic spin-S Heisenberg chains*, *Phys. Rev. B* **46**, 2896 (1992).

[115] T. M. Rice, S. Gopalan, M. Sigrist, *Superconductivity, spin gapsnn and Luttinger liquids in a class of cuprates*, *Europhys. Lett.* **23**, 445 (1993).

[116] B. Frischmuth, B. Ammon, M. Troyer, *Susceptibility and low-temperature thermodynamics of spin-1/2 Heisenberg ladders*, *Phys. Rev. B* **54**, 3714 (1996).

[117] M. Sato, *N-leg integer-spin ladders and tubes in commensurate external fields: Nonlinear sigma model approach*, *Phys. Rev. B* **72**, 104438 (2005).

[118] D. Allen, D. Sénéchal, *Spin-1 ladder: A bosonization study*, *Phys. Rev. B* **61**, 12134 (2000).

[119] F. Anfuso, A. Rosch, *Fragility of string orders*, *Phys. Rev. B* **76**, 085124 (2007).

[120] S. Todo, M. Matsumoto, C. Yasuda, H. Takayama, *Plaquette-singlet solid state and topological hidden order in a spin-1 antiferromagnetic Heisenberg ladder*, *Phys. Rev. B* **64**, 224412 (2001).

[121] M. Sato, M. Oshikawa, *Magnon bands of N-leg integer-spin antiferromagnetic systems in the weak-interchain-coupling regime*, *Phys. Rev. B* **75**, 014404 (2007).

[122] C. Mennerich, H.-H. Klauss, M. Broekelmann, F. J. Litterst, C. Golze, R. Klingeler, V. Kataev, B. Büchner, S.-N. Grossjohann, W. Brenig, M. Goiran, H. Rakoto, J.-M. Broto, O. Kataeva, D. J. Price, *Antiferromagnetic dimers of Ni(II) in the S=1 spin-ladder* $Na_2Ni_2(C_2O_4)_3(H2O)_2$, *Phys. Rev. B* **73**, 174415 (2006).

[123] F. Damay, C. Martin, V. Hardy, A. Maignan, G. André, K. Knight, S. R. Giblin, L. C. Chapon, *Zigzag ladders with staggered magnetic chirality in the S=3/2 compound $CaCr_2O_4$*, *Phys. Rev. B* **81**, 214405 (2010).

[124] F. Damay, C. Martin, V. Hardy, A. Maignan, C. Stock, S. Petit, *Quantum gapped spin excitations in the S=3/2 zigzag ladder compound $CaCr_2O_4$*, *Phys. Rev. B* **84**, 020402 (2011).

[125] M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, Y. Kitaoka, *Observation of a spin Gap in $SrCu_2O_3$ comprising spin-$1/2$ quasi-1D two-Leg ladders*, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3463 (1994).

[126] R. Nath, K. M. Ranjith, B. Roy, D. C. Johnston, Y. Furukawa, A. A. Tsirlin, *Magnetic transitions in the spin-5/2 frustrated magnet BiMn2PO6 and strong lattice softening in $BiMn_2PO_6$ and BiZn2PO6 below 200 K* **90**, 024431 (2014).

[127] J. C. Xavier, *A simple way to avoid metastable configurations in the density-matrix renormalization-group algorithms*, *Braz. J. Phys.* **39**, 596 (2009).

[128] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, H. Tasaki, *Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets*, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799 (1987).

[129] T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera, E. S. Swanson, *Excitation spectrum of Heisenberg spin ladders*, *Phys. Rev. B* **47**, 3196 (1993).

[130] S. Qin, Y. Liu, L. Yu, *Finite-size scaling for low-energy excitations in integer Heisenberg spin chains*, *Phys. Rev. B* **55**, 2721 (1997).

[131] O. Golinelli, Th. Jolicoeur, R. Lacaze, *Finite-lattice extrapolations for a Haldane-gap antiferromagnet*, *Phys. Rev. B* **50**, 3037 (1994).

[132] G. Sun, *Numerical solution of the spin-2 Heisenberg antiferromagnetic chains using a projector method*, *Phys. Rev. B* **51**, 8370 (1995).

[133] S. Qin, S. Wang, L. Yu, *Universality class of integer quantum spin chains: S=2 case study*, *Phys. Rev. B* **56**, 14251 (1997).

[134] M. Fuehringer, S. Rachel, R. Thomale, M. Greiter, P. Schmitteckert, *DMRG studies of critical SU(N) spin chains*, *Ann. Phys. (Berlin)* **17**, 922 (2008).

[135] 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).

[136] K. Hallberg, X. Q. G. Wang, P. Horsch, A. Moreo, *Critical Behavior of the S = 3/2 Antiferromagnetic Heisenberg Chain*, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4955 (1996).

[137] J. Lou, S. Qin, T.-K. Ng, Z. Su, *Topological effects in short antiferromagnetic Heisenberg chains*, *Phys. Rev. B* **65**, 104401 (2002).

[138] U. -J. Wiese, H. -P. Ying, *A determination of the low energy parameters of 2-d Heisenberg antiferromagnet*, *Z. Phys. B* **33**, 147 (1994).

[139] T. Kennedy, *Exact diagonalisations of open spin-1 chains*, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 5737 (1990).

[140] T.-K. Ng, *Edge states in antiferromagnetic quantum spin chains*, *Phys. Rev. B* **50**, 555 (1994).

[141] S. Qin, T. Ng, Z. Su, *Edge states in open antiferromagnetic Heisenberg chains*, *Phys. Rev. B* **52**, 12844 (1995).

[142] A. Machens, N. P. Konstantinidis, O. Waldmann, I. Schneider, S. Eggert, *Even-odd effect in short antiferromagnetic Heisenberg chains*, *Phys. Rev. B* **87**, 144409 (2013).

[143] U. Schollwöck, T. Jolicoeur, *Haldane Gap and Hidden Order in the S=2 antiferromagnetic Quantum Spin Chain*, *Europhys. Lett.* **30**, 493 (1995).

[144] E. S. Sorensen, I. Affleck, *Large-scale numerical evidence for Bose condensation in the S=1 antiferromagnetic chain in a strong field*, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1633 (1993).

[145] 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).

[146] 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).

[147] R. Horodeck, P. Horodeck, M. Horodeck, K. Horodeck, *Quantum entanglement*, *Rev. Mod. Phys* **81**, 865 (2009).

[148] P. Calabrese, J. Cardy, *Entanglement entropy and conformal field theory*, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504005 (2009).

[149] M. Srednicki, *Entropy and area*, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 666 (1993).

[150] M. B. Plenio, J. Eisert, J. Dreißig, M. Cramer, *Entropy, entanglement, and area: Analytical results for harmonic lattice systems*, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 6, 060503 (2005).

[151] S. Farkas, Z. Zimborás, *The von Neumann entropy asymptotics in multidimensional fermionic systems*, *J. Math. Phys.* **48**, 102110 (2007).

[152] H. Leschke, A. V. Sobolev, W. Spitzer, *Scaling of Rényi Entanglement Entropies of the Free Fermi-Gas Ground State: A Rigorous Proof*, *Phys. Rev. Lett* **112**, 160403 (2014).

[153] P. Calabrese, M. Mintchev, E. Vicari, *Entanglement entropies in free-fermion gases for arbitrary dimension*, *Europhys. Lett.* **97**, 20009 (2012).

[154] A. B. Kallin, I. González, M. B. Hastings, R. G. Melko, *Valence Bond and von Neumann Entanglement Entropy in Heisenberg Ladders*, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 117203 (2009).

[155] 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).

[156] E. Fradkin, J. E. Moore, *Entanglement Entropy of 2D Conformal Quantum Critical Points: Hearing the Shape of a Quantum Drum*, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 050404 (2006).

[157] J.-M. Stéphan, S. Furukawa, G. Misguich, V. Pasquier, *Shannon and entanglement entropies of one- and two-dimensional critical wave functions*, *Phys. Rev. B* **80**, 184421 (2009).

[158] P. Calabrese, M. Campostrini, F. Essler, B. Nienhuis, *Parity effects in the scaling of block entanglement in gapless spin chains*, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 095701 (2010).

[159] J. C. Xavier, F. C. Alcaraz, *Finite-size corrections of the Entanglement Entropy of critical quantum chains*, *Phys. Rev. B* **85**, 024418 (2012).

[160] M. Fagotti, *New insights into the entanglement of disjoint blocks*, *Europhys. Lett.* **97**, 17007 (2012).

[161] D. Eloy, J. C. Xavier, *Entanglement Entropy of the Low-Lying Excited States and Critical Properties of an Exactly Solvable Two-Leg Spin Ladder with Three-Spin Interactions*, *Phys. Rev. B,* **86**, 064421 (2012).

[162] B. Bauer, L. Cincio, B.P. Keller, M. Dolfi, G. Vidal, S. Trebst, A.W.W. Ludwig, *Chiral spin liquid and emergent anyons in a Kagome lattice Mott insulator*, *Nat. Commun.* **5**, 5137 (2014).

[163] R. V. Mishmash, M. S. Block, R. K. Kaul, D. N. Sheng, O. I. Motrunich, M. P. A. Fisher, *Bose metals and insulators on multileg ladders with ring exchange*, *Phys. Rev. B* **84,**, 245127 (2011).

[164] I. Peschel, *Calculation of reduced density matrices from correlation functions*, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **36**, 14, L205 (2003).

[165] H.-Q. Zhou, T. Barthel, J. O. Fjærestad, U. Schollwöck, *Entanglement and boundary critical phenomena*, *Phys. Rev. A* **74**, 050305(R) (2006).

[166] J. C. Xavier, *Entanglement Entropy, Conformal Invariance, and the Critical Behavior of the Anisotropic Spin-s Heisenberg Chains: DMRG study*, *Phys. Rev. B* **81**, 224404 (2010).

[167] F. C Alcaraz, M. N. Barber, M. T. Batchelor, *Conformal invariance, the XXZ chain and the operator content of two-dimensional critical systems*, *Ann. Phys.* **182**, 280 (1988).

[168] J. C. Xavier, F. C. Alcaraz, *Precise Determination of Quantum Critical Points by the Violation of the Entropic Area Law*, *Phys. Rev. B* **84**, 094410 (2011).

[169] H. W. J. Blöte, Y. Deng, *Cluster Monte Carlo simulation of the transverse Ising model*, *Phys. Rev. E* **66**, 066110 (2002).

[170] G. Evenbly, G. Vidal, *Entanglement Renormalization in Two Spatial Dimensions*, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 180406 (2009).

[171] N. Kitanine, J.M. Maillet, V. Terras, *Form factors of the XXZ Heisenberg spin-1/2 finite chain*, *Nuv. Phys.* **B554**, 647 (1999).

[172] J.-S. Caux, J. M.l Maillet, *Computation of Dynamical Correlation Functions of Heisenberg Chains in a Magnetic Field*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 077201 (2005).

[173] A. Imambekov, L. I. Glazman, *Universal Theory of Nonlinear Luttinger Liquids*, *Science* **323**, 228 (2009).

[174] J. L. Cardy, *Boundary Conditions, Fusion Rules and the Verlinde Formula*, *Nucl. Phys. B* **324**, 581 (1989).

[175] C. Kane, M. Fisher, *Transmission though barriers and resonant tunneling in an interacting one-dimensional electron gas*, *Physical Review B* **46**, 23, 15233 (1992).

[176] E. Wong, I. Affleck, *Tunneling in quantum wires - a boundary conformal field-theory approach*, *Nucl. Phys. B* **417**, 3, 403 (1994).

[177] M. Fabrizio, A. O. Gogolin, *Interacting one-dimensional electron gas with open boundaries*, *Phys. Rev. B* **51**, 17827 (1995).

[178] S. Eggert, I. Affleck, *Magnetic impurities in half-integer-spin Heisenberg antiferromagnetic chains*, *Phys. Rev. B* **46**, 10866 (1992).

[179] R. Egger, H. Grabert, *Friedel Oscillations for Interacting Fermions in One Dimension*, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 19, 3505 (1995).

[180] A. Leclair, F. Lesage, H. Saleur, *Exact Friedel oscillations in the g=1/2 Luttinger liquid*, *Phys. Rev. B* **54**, 13597 (1996).

[181] S. Rommer and S. Eggert, *Spin- and charge-density oscillations in spin chains and quantum wires*, *Phys. Rev. B* **62**, 4370 (2000).

[182] N. Laflorencie, E. S. Sørensen, M. S. Chang, I. Affleck, *Boundary Effects in the Critical Scaling of Entanglement Entropy in 1D Systems*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 100603 (2006).

[183] L. Taddia, J. C. Xavier, F. C. Alcaraz, G. Sierra, *Entanglement entropies in conformal systems with boundaries*, *Phys. Rev. B* **88**, 075112 (2013).

[184] M. Gaudim, *Une démonstration simplifiéedu théorème de Wick en mécanique statistique*, *Nuclear Physics* **15**, 89 (1960).

[185] S. Tomonaga, *Remarks on Bloch's Method of Sounds Waves applied to Many-Fermion Problems*, *Prog Theor Phys* **5**, 4 (1950).

[186] S. Eggert, H. Johannesson, A. Mattsson, *Boundary Effects on Spectral Properties of Interacting Electrons in One Dimension*, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1505 (1996).

[187] A. E. Mattsson, S. Eggert, H. Johannesson, *Phys. Rev. B* **56**, 15615 (1997).

[188] R. G. Pereira, S. R. White, I. Affleck, *Exact Edge Singularities and Dynamical Correlations in Spin-1/2 Chains*, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 027206 (2008).

[189] H. J. Schulz, *Phase diagrams and correlation exponents for quantum spin chains of arbitrary spin quantum number*, *Phys. Rev. B* **34**, 9, 6372 (1986).

[190] F. C. Alcaraz, M. N. Barber, M. T. Batchelor, R. J. Baxter, G. R. W. Quispel, *Surface exponents of the quantum XXZ, Ashkin-Teller and Potts models*, *J. Phys. A: Math. Gen.* **20**, 6397 (1987).

[191] R. G. Pereira, S. R. White, I. Affleck, *Spectral function of spinless fermions on a one-dimensional lattice*, *Phys. Rev. B* **79**, 165113 (2009).

[192] J. Timonen, A. Luther, *Continuum-limit correlation functions for the spin-one anisotropic Heisenberg chain* **18**, 1439 (1985).

[193] W. Chen, K. Hida, B. C. Sanctuary, *Ground-state phase diagram of S=1 XXZ chains with uniaxial single-ion-type anisotropy*, *Phys. Rev. B* **67**, 104401 (2003).

[194] P. DiFrancesco, P. Mathieu, D. Sénéchal, *Conformal Field Theory*, Springer, Berlin (1997).

[195] A. L. Gaunt, T. F. Schmidutz, I. Gotlibovych, R. P. Smith, Z. Hadzibabic, *Bose-Einstein Condensation of Atoms in a Uniform Potential*, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 200406 (2013).

[196] K. Okamoto, K. Nomura, *Fluid-dimer critical point in S = 1/2 antiferromagnetic Heisenberg chain with next nearest neighbor interactions*, *Phys. Lett. A* **169**, 433 (1992).

[197] S. Eggert, *Numerical evidence for multiplicative logarithmic corrections from marginal operators*, *Phys. Rev. B* **54**, R9612 (1996).

[198] H.-J. Grafe, S. Nishimoto, M. Iakovleva, E. Vavilova, A. Alfonsov, M.-I. Sturza, S. Wurmehl, H. Nojiri, H. Rosner, J. Richter, U.K. Röbler, S.-L. Drechsler, V. Kataev, B. Büchner, *Evidence for a magnetic field-induced "hidden"spin nematic phase in the frustrated and anisotropic spin-chain cuprate* $LiCuSbO_4$, *http://arxiv.org/abs/1607.05164* (2016).

[199] A. V. Chubukov, *Chiral, nematic, and dimer states in quantum spin chains*, *Phys. Rev. B* **44**, 4693(R) (1991).

[200] O. A. Starykh, L. Balents, *Excitations and quasi-one-dimensionality in field-induced nematic and spin density wave states*, *Phys. Rev. B* **89**, 104407 (2014).

[201] G. Gorohovsky, R. G. Pereira, E. Sela, *Chiral spin liquids in arrays of spin chains*, *Phys. Rev. B* **91**, 245139 (2015).

[202] P. W. Anderson, *Resonating valence bonds: A new kind of insulator?*, *Mater. Res. Bull.* **8**, 153 (1973).

[203] P. A. Lee, N. Nagaosa, X.-G. Wen, *Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity*, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).

[204] B. I. Halperin, *Quantized hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two dimensional disordered potential*, *Phys. Rev. B* **25**, 2185 (1982).

[205] X. G. Wen, *Chiral luttinger liquid and the edge excitations in the fractional quantum hall states*, *Phys. Rev. B* **41**, 12838 (1990).

[206] M. Sekania, *Phase Transitions and Real-Time Dynamics of Spin and Charge Densities in One-Dimensional Correlated Systems*, Master's thesis, University of Augsburg (2011).

[207] R. Feynman, *Statistical Mechanics: a Set of Lectures*, Frontiers in Physics: lecture Notes Series, 13 ed., Addison Wesley (1990).

[208] M. Abramowitz, I. A. Stegun (Eds.) *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York (1965).

[209] I. Peschel, *Special Review: Entanglement in Solvable Many-Particle Models*, *Braz. J. Phys.* **42**, 267 (2012).

[210] J. I. Latorre, A. Riera, *A short review on entanglement in quantum spin systems*, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504002 (2009).