

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

RAPHAEL CAVALCANTE ALÉCIO

**Processos de magnetização e emaranha-  
mento quântico no tubo triangular de  
spins- $\frac{1}{2}$  frustrados.**

Maceió - Brasil

Maio - 2017

RAPHAEL CAVALCANTE ALÉCIO

# Processos de magnetização e emaranhamento quântico no tubo triangular de spins- $\frac{1}{2}$ frustrados.

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Matéria Condensada do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Física

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

Maceió - Brasil

Maio - 2017

**Catálogo na fonte**  
**Universidade Federal de Alagoas**  
**Biblioteca Central**  
**Divisão de Tratamento Técnico**

Bibliotecária Responsável: Helena Cristina Pimentel do Vale

A352p Alécio, Raphael Cavalcante.  
Processos de magnetização e emaranhamento quântico no tubo triangular de spins –<sup>1</sup> frustrados / Raphael Cavalcante Alécio. – 2017.  
<sub>2</sub>  
201 f. : il. tabs., grafis.  
  
Orientador: Marcelo Leite Lyra.  
Tese (doutorado em Física da Matéria Condensada) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2017.  
  
Bibliografia: f. 152-160.  
  
1. Spin tube. 2. Frustração geométrica. 3. Platôs de magnetização. 4. Efeito magnetocalórico. 5. Emaranhamento quântico. I. Título.

CDU: 537.61



**Universidade Federal de Alagoas**  
**Instituto de Física**  
Programa de Pós Graduação em Física

BR 104 km 14. Campus A.C. Simões  
Cidade Universitária  
Tabuleiro dos Martins  
57072-970 Maceió - AL, Brasil  
FONE : (82) 3214-1423/FAX 3214-1645

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE**  
**TESE DE DOUTORADO**

***“Processos de magnetização e emaranhamento quântico no tubo  
triangular de spins -1/2 frustrados”***

**por**

**Raphael Cavalcante Alécio**

A Banca Examinadora composta pelos professores Marcelo Leite Lyra (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Maria Socorro Seixas Pereira, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Raimundo Rocha dos Santos, do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro, João Antônio Plascak, do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba e José Candido Xavier, do Centro de Ciências Exatas e Tecnologia da Universidade Federal de Uberlândia, consideram o candidato **aprovado com grau “A”**.

Maceió, 26 de maio de 2017

  
Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

  
Prof.ª Dr.ª Maria Socorro Seixas Pereira

  
Prof. Dr. Raimundo Rocha dos Santos

  
Prof. Dr. João Antônio Plascak

  
Prof. Dr. José Cândido Xavier

Dedico esta, bem como minhas demais conquistas,  
aos meus pais e a meu avô, Valdir, que seguraram  
a minha mão e me ajudaram a caminhar, mesmo  
quando eu não sabia para onde estava indo.

---

## AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer minha família pelo suporte para vencer os obstáculos mais difíceis e me amar do jeito que sou. Pelo avô maravilho que possuo, um grande exemplo de homem responsável e dono de um dos corações mais puros que conheci.

Agradeço também ao meu pai, Carlos, e à minha mãe, Rosemeire, pela contínua dedicação e amor sem o qual não teria chegado tão longe. Meus pais serão para sempre os melhores amigos que um filho pode ter e os maiores heróis que já existiram na face deste pequeno planeta azul em que vivemos.

À minha irmã, Camilla, por ser minha grande amiga, pelos momentos de companheirismo nesses últimos anos de doutorado.

À minha irmã, Carolyn, por me amar e me entender mesmo sem eu precisar dizer uma palavra.

À minha filha, Laura, que ainda não nasceu, mas já me ensina grandes lições. Papai te ama, filha.

Ao meu orientador, Marcelo Lyra, não somente pela orientação, na qual mostrou-me como ser um verdadeiro pesquisador e profissional, mas pela sua incrível capacidade de me ensinar e enorme paciência durante todo meu doutorado.

Ao amigo, Francisco Fidelis, que durante todo meu doutoramento foi um grande pai, em todos os sentidos carinhosos que essa palavra possa assumir. E aos seus grandes conselhos, sem os quais eu não poderia ser metade do que sou hoje.

Pre docenta Jozefa, ďalej pre Katku a Janku za to, že sú to najlepšie priatel'ia akých som v celej Európe mohol nájsť. Veľké objatie pre mojich priateľov z Katedry teoretickej fyziky a astrofyziky v Košiciach. Veľmi pekne Vám za všetko ďakujem.

To all my foreign friends who welcomed me as a family called Erasmus program in the city of Kosice in 2014/2015. And especially for my brothers who lived with me at the MEI hostel Kosmalt.

À todos os meus colegas e demais professores do departamento de física da UFAL, pela continua excelência do trabalho científico realizado em nosso estado.

À todos os meus irmãos de outras mães: Alysson, Renata, Ryan, Junior e Lucian, pelas risadas nos momentos felizes e o ombro amigo nos momentos de tristeza.

E à todos aqueles que contribuíram direta e indiretamente que infelizmente não os pude citar, saibam o quanto eu os sou agradecido.

Os poetas reclamam que a ciência retira a  
beleza deste magnificente universo que nos cerca.

O que será que eles realmente não conhecem:  
a ciência ou o universo?

”RAPHAEL C. ALÉCIO”

---

## RESUMO

Esta tese é dedicada ao estudo analítico e numérico do emaranhamento quântico e não-localidade em modelos de tubos de spin quânticos fortemente correlacionados, em conexão com diversas propriedades termodinâmicas e processos de magnetização. Mais especificamente, o estudo se alicerça na análise do comportamento dessas grandezas físicas dentro de uma rede de spin particular que inclui interações competitivas e flutuações quânticas conhecida como escada de spins (sistema entre uma e duas dimensões) de três pernas ou tubo de spin triangular, devido às condições de contorno periódicas impostas aos três spins que formam os degraus Heisenberg desta rede. Em sistemas com essa estrutura, formam-se platôs de magnetização devido à competição imposta pela frustração geométrica que a rede impõe aos spins e o campo externo aplicado. Tal competição é o mecanismo que define a orientação dos domínios magnéticos que a rede irá apresentar, que dentro de regiões específicas do espaço de parâmetros da rede criam regiões onde há resposta descontínua da magnetização local a variações do campo externo. Tais regiões são conhecidas como platôs de magnetização. O tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg consiste num tubo de spin- $\frac{1}{2}$  formado por células unitárias triangulares com 3 spins interligados por acoplamentos, entre os primeiros vizinhos, de Heisenberg. Entretanto os pares de spins primeiros vizinhos pertencentes à células diferentes têm interação intermediada através de ligações clássicas tipo Ising. Utilizou-se um procedimento analítico exato, conhecido como técnica da matriz de transferência, que possibilitou obter as soluções analíticas para diversas propriedades termodinâmicas do modelo, entre as quais magnetização, calor específico e perfis de magnetização. Estas foram avaliadas em função da temperatura, campo magnético externo e acoplamentos relevantes. Entretanto, se fez necessário aplicar uma metodologia diferente para se obter medidas termodinâmicas para o outro modelo proposto nesta tese: o tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg, que consiste num tubo de spin- $\frac{1}{2}$  com estrutura semelhante ao anterior, exceto que os pares de spins primeiros vizinhos pertencentes a células diferentes tem sua interação intermediada através de ligações quânticas tipo Heisenberg. Neste caso utilizou-se um procedimento numérico do método do grupo de renormalização da matriz densidade quântica, conhecido como DMRG devido a sua denominação na língua inglesa, sendo providencial para se obter os diagramas de estado fundamental, processos de magnetização, e emaranhamento quântico do tubos triangular de Heisenberg em função do campo magnético externo e acoplamentos relevantes. Nos dois modelos, as curvas de magnetização exibem saltos descontínuos da magnetização e platôs intermediários devido a transições de fase descontínuas induzidas pela aplicação do campo externo. Estas transições também se refletem no comportamento exótico de algumas quantidades termodinâmicas destes modelos, tais como, a presença de um pico pronunciado de baixa temperatura na curva do calor específico e um efeito magnetocalórico ressaltado.

**Palavras-chave:** 1. Spin tube. 2. Frustração geométrica. 3. Platôs de magnetização. 4. Efeito magnetocalórico. 5. Emaranhamento quântico. 6. Não-localidade.



---

## ABSTRACT

This thesis is dedicated to the analytical and numerical study of quantum entanglement and nonlocality in strongly correlated quantum spin tube models in connection with various thermodynamic properties and magnetization processes. More specifically, the study builds on the analysis of the behavior of these physical quantities within a particular spinning network that includes competitive interactions and quantum fluctuations known as a three-leg spins ladder or triangular spin tube, due to the periodic boundary conditions imposed on the three spins that form the Heisenberg steps of this network. In systems with this structure described above, magnetization plateaus are formed due to the competition imposed by the geometric frustration that the network imposes on the spins and the applied external field. Such competition is the mechanism that defines the orientation of the magnetic domains that the network will present, which within specific regions of the network parameters space create regions where there is a discontinuous response of local magnetization to external field variations, such regions are known as magnetization plateaus. To evaluate the frustrated spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg triangular tube consisting of a spin tube formed by triangular unit cells with 3 spins- $\frac{1}{2}$  interconnected by Heisenberg couplings between neighboring first spins and the pairs of neighboring first spins belonging to the different cells have their interaction intermediated through classical Ising couplings, an exact analytical procedure, known as a transfer-matrix technique, was used to obtain the analytical solutions for various thermodynamic properties of the model, including magnetization, specific heat and magnetization profiles. These quantities were evaluated as a function of temperature, external magnetic field and the relevant couplings. However, it was necessary to apply a different methodology to obtain thermodynamic measurements for the other model proposed in this thesis: the frustrated spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg triangular tube, which consists of a spin tube with similar structure to the previous one, except that the pairs of the first neighboring spins belonging to the different cells interact through Heisenberg-type quantum connections. In this case, a numerical procedure known as the quantum density matrix renormalization group method, known as DMRG, is used to obtain the ground state diagrams, magnetization processes, and bipartite quantum entanglement of the Heisenberg triangular tubes as a function of the external magnetic field and the relevant couplings. In both models, the magnetization curves exhibit discontinuous magnetization jumps and intermediate plateaus due to discontinuous phase transitions induced by the external field, These transitions are also reflected in the exotic behavior of some thermodynamic quantities of the models, such as the presence of a striking low temperature peak for the specific heat curve and a highlighted magnetocaloric effect.

**Keywords:** 1. Spin tube. 2. Geometric frustration. 3. Magnetization plateau. 4. Magnetocaloric effect. 5. Quantum entanglement. 6. Nonlocality.

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1	Sistemas Magnéticos de Spin - Histórico . . . . .	1
1.2	Motivações Tecnológicas . . . . .	6
1.3	Apresentação Geral do Trabalho . . . . .	11
<b>2</b>	<b>MODELOS MAGNÉTICOS EM REDES DE SPIN</b>	<b>13</b>
2.1	Contextualização Histórica . . . . .	13
2.2	Interação de Troca e o Magnetismo . . . . .	14
2.3	Modelo de Ising em um Campo Longitudinal . . . . .	23
2.3.1	Metódo Aproximativo: Teoria do Campo Molecular . . . . .	23
2.3.2	Solução Exata: Metódo da Matrix de Transferência . . . . .	27
2.3.3	Solução Exata: Correlações e Criticalidade . . . . .	33
2.4	Modelo de Heisenberg . . . . .	36
2.5	Efeito magnetocalórico . . . . .	40
2.6	Sistemas de spin frustrados . . . . .	45
2.7	Platôs de Magnetização . . . . .	46
<b>3</b>	<b>EMARANHAMENTO QUÂNTICO</b>	<b>48</b>
3.1	Decomposição de estados . . . . .	48
3.2	Emaranhamento de estados puros . . . . .	60
3.3	Teorema de Bell . . . . .	68
3.4	Emaranhamento de estados mistos . . . . .	75
3.5	Quantificação de Emaranhamento . . . . .	79
3.5.1	Crítérios para Separabilidade . . . . .	79

3.5.2	Propriedades dos quantificadores de emaranhamento . . . . .	84
3.5.3	Emaranhamento de formação . . . . .	85
3.6	Concorrência . . . . .	87
<b>4</b>	<b>GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO</b>	<b>92</b>
4.1	Teoria de Bandas de Energia . . . . .	92
4.2	Modelos com Impurezas Magnéticas Diluidas . . . . .	96
4.3	Grupo de Renormalização Clássico . . . . .	99
4.3.1	Técnica de Escalonamento . . . . .	99
4.3.2	Procedimento de Truncagem de Estados . . . . .	100
4.3.3	Fluxo de Renormalização . . . . .	102
<b>5</b>	<b>GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DA MATRIZ DE DENSIDADE (DMRG)</b>	<b>106</b>
5.1	Surgimento do DMRG . . . . .	106
5.2	Simetrias e a Redução do Espaço de Hilbert . . . . .	109
5.3	Processo de Truncagem em Blocos . . . . .	112
5.4	Técnica do Grupo de Renormalização da Matriz Densidade . . . . .	118
5.4.1	Algoritmo da Cadeia Infinita . . . . .	118
5.4.2	Algoritmo da Cadeia Finita . . . . .	120
5.4.3	DMRG Aplicado ao Modelo 1D Antiferromagnético de Heisenberg .	122
5.5	Cálculo dos Observáveis no DMRG . . . . .	129
5.6	Cálculo da Magnetização através do DMRG . . . . .	132
<b>6</b>	<b>TUBO TRIANGULAR DE SPIN-<math>\frac{1}{2}</math> DE ISING-HEISENBERG</b>	<b>136</b>
6.1	Tubo de Ising-Heisenberg na Presença do Campo Externo . . . . .	137
6.1.1	Método . . . . .	137
6.1.2	Resultados e Discussões . . . . .	144
6.2	Tubo Triangular de Ising-Heisenberg a Campo Nulo. . . . .	161
6.2.1	Metódo . . . . .	161
6.2.2	Resultados e Discussões . . . . .	165
<b>7</b>	<b>TUBO TRIANGULAR DE SPIN-<math>\frac{1}{2}</math> DE HEISENBERG</b>	<b>183</b>
7.0.1	Método . . . . .	183

---

7.0.2 Resultados e Discussões . . . . .	186
<b>8 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS</b>	<b>193</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>196</b>
<b>Anexos</b>	<b>209</b>
<b>Anexo A Primeiro Artigo Publicado</b>	<b>210</b>
<b>Anexo B Segundo Artigo Publicado</b>	<b>221</b>
<b>Anexo C Terceiro Artigo Publicado</b>	<b>230</b>

# Lista de Figuras

2.1	Geometria da rede degrau de spin- $\frac{1}{2}$ , conhecida como modelo Majumdar-Ghosh para o caso $a = \frac{1}{2}$ , com $J$ representando as interações entre os pares de spins primeiros vizinhos e $aJ$ representando as interações entre os pares de spins segundos vizinhos. . . . .	37
3.1	Biparticionando um sistema quântico em dois blocos A e B através das bases ortonormais dos blocos. . . . .	52
3.2	O estado de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) é constituído de partículas de spin- $\frac{1}{2}$ que estão em uma alternância de estados: de estados tripletos (representados pelos círculos com spin total 1) e estados singletos (barras vermelhas). . . . .	56
3.3	Gedankenexperiment de Bohm: duas partículas, $A$ e $B$ , de spin $\frac{1}{2}$ são produzidas pelo decaimento de uma molécula $C$ com spin total 1. Posteriormente, o aparato de Stern-Gerlach é aplicada sobre a partícula $A$ . . . . .	69
4.1	Diminuição da resistência, de metais do grupo do cobre, até um valor constante com o redução da temperatura (curva em azul). Outros grupos de compostos metálicos tornam-se supercondutores abaixo de um certo limiar, conhecido como temperatura crítica (curva em verde). Em outro grupo de metais, que apresentam impurezas magnéticas, a resistência apresenta um mínimo, em uma temperatura conhecida como temperatura de Kondo. Figura adaptada de [1]. . . . .	93

5.1	Aumento (Diminuição) do bloco esquerdo (direito) durante um dos passos da movimentação "da esquerda para direita" dentro do sweep do DMRG do sistema finito de tamanho $L$ . . . . .	121
5.2	Diagrama de transição entre as 3 configurações, para o tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$ com $L = 12$ , através de uma busca pelo menor valor do campo $h(T_i^z)$ . Os valores de campo utilizados para as três configurações são meramente ilustrativos. A transição em roxo representa um salto da magnetização dentro de uma mesma configuração (configuração 1). A transição em azul representa um salto da magnetização entre configurações diferentes. As transições em verde são transições entre setores adjacentes dentro de uma mesma configuração. As regiões em vermelho são regiões proibidas para o mapeamento em questão, cujo setor de magnetização é maior que o da cadeia mapeada. . . . .	135
6.1	Geometria do modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$ frustrado de Ising-Heisenberg. As linhas sólidas representam os acoplamentos XXZ de Heisenberg dentro da célula unitária triangular ( $J_z, J_x$ ). As linhas finas correspondem às interações de Ising entre as células unitárias. . . . .	137
6.2	Diagrama de fase do estado fundamental do modelo de tubo de spin- $\frac{1}{2}$ de Ising-Heisenberg tube no plano $J_1/J - h/J$ , definindo 6 possibilidades para os estado fundamental do modelo. . . . .	145
6.3	Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento antiferromagnético clássico. . . . .	146
6.4	Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento ferromagnético clássico. . . . .	146
6.5	Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento antiferromagnético quântico. . . . .	147
6.6	Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento ferrimagnético quântico. . . . .	147
6.7	Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento misto quântico-clássico ferrimagnético. . . . .	148
6.8	Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento misto quântico-clássico ferromagnético. . . . .	148

- 6.9 Gráfico da entropia por spin em função da temperatura para alguns valores do campo magnético dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ . . . . . 151
- 6.10 Curvas isentrópicas no diagrama do campo magnético externo  $\frac{h}{J}$  em função da temperatura  $\frac{k_B T}{J}$  dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ . . . . . 153
- 6.11 Gráfico do calor específico por spin em função da temperatura para alguns valores do campo magnético dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ . . . . . 155
- 6.12 Gráfico da magnetização normalizada com respeito ao valor de saturação em função do campo magnético dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ . Percebe-se, em ambos os casos, a presença dos platôs um terço e dois terços após as regiões de transição. . . . . 157
- 6.13 Gráfico da correlação  $C_{xx}$  em função do campo magnético externo  $\frac{h}{J}$  para alguns valores da temperatura  $\frac{k_B T}{J}$  dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ . . . . . 159
- 6.14 Gráfico da correlação  $C_{zz}$  em função do campo magnético externo  $\frac{h}{J}$  para alguns valores da temperatura  $\frac{k_B T}{J}$  dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ . . . . . 160
- 6.15 O diagrama do estado fundamental do modelo do tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg no plano  $J_x - J_z$ . Os números escritos dentro dos colchetes representam o spin total e a componente  $z$  em duas células unitárias consecutivas  $[T_{2i-1}, T_{2i-1}^z; T_{2i}, T_{2i}^z]$ . . . . . 166
- 6.16 Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento antiferromagnético clássico. . . . . 166

6.17	Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento simétrico trimerizado quântico. . . . .	167
6.18	Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento antiferromagnético quântico. . . . .	168
6.19	Funções de correlação de pares em função da temperatura para o conjunto de parâmetros $(J_z, J_x)$ constante representando em cada figura uma das três fases do estado fundamental: (a) $J_x = 1, J_z = 1$ (fase CAF), (b) $J_x = -2, J_z = 2$ (fase SQT) e (c) $J_x = 2, J_z = 2$ (fase DCP) . . . . .	170
6.20	(a) O comportamento reentrante da temperatura de frustração $T_f$ nas vizinhanças da região de transição das fases CAF-SQT para o caso particular de $J_z = 1$ . (b) Dependência da função de correlação com a temperatura para o conjunto de parâmetros $(J_z = 1.0, J_x = -1.002)$ usados para confirmar o comportamento das correlações na região reentrância de $T_f$ (uma fina linha horizontal foi colocada sobre o valor nulo apenas como guia para a observação). . . . .	172
6.21	Temperatura de frustração $T_f$ como função da componente transversal do acoplamento de Heisenberg $J_x$ para alguns valores específicos da componente longitudinal $J_z$ . . . . .	173
6.22	Dependência térmica da Concorrência em função da componente transversal do acoplamento de Heisenberg $J_x$ para alguns valores específicos da componente $J_z$ : (a) $J_z = 2.0$ ; (b) $J_z = 1.8$ . . . . .	174
6.23	Temperatura limiar $T_t$ como função da componente transversal do acoplamento de Heisenberg $J_x$ para alguns valores específicos da componente $J_z$ . O zoom mostra, em detalhes, a região de reentrância para o caso particular $J_z = 1.8$ . . . . .	175
6.24	Dependência da temperatura limiar $T_t$ (linhas sólidas) e da temperatura de frustração $T_f$ (linhas pontilhadas) em função da componente transversal $J_x$ para diversos valores da componente longitudinal $J_z$ . A figura (a) mostra o comportamento reentrante da temperatura limiar $T_t$ e a figura (b) o comportamento reentrante da temperatura de frustração $T_f$ . . . . .	176



- 6.25 (a) Função de Bell em função da temperatura para 3 conjuntos diferentes de parâmetros de Heisenberg ( $J_z, J_x$ ) correspondendo aos 3 estados fundamentais disponíveis: ( $J_z = J_x = 1.0$ ) dentro da fase FAC, ( $J_z = -J_x = 2.0$ ) dentro da fase SQT e ( $J_z = J_x = 2.0$ ) dentro da fase DAQ. (b) Variação térmica do valor absoluto das correlações longitudinais e transversais para a mesma célula unitária quando estamos dentro da fase FAC ( $J_z = J_x = 1.0$ ). . . . . 178
- 6.26 Calor específico por spin em função da temperatura para um valor específico do acoplamento longitudinal  $J_z = 1$  e alguns valores da componente transversal de Heisenberg  $J_x$ , selecionados dentro de cada uma das fases que formam o diagrama de fase do modelo: (a) dentro da fase CAF (b) dentro da fase SQT e (c) dentro da fase DCP. . . . . 179
- 6.27 (a) Figura em escala semi-logarítmica da dependência térmica do calor específico por spin exatamente na região de transição entre as fases CAF -DCP, em  $J_z = 1.0$  e  $J_x = 2.0$ . (b) Pico inferior para o calor específico em função da temperatura quando  $J_z = 1.0$  e  $J_x = 1.9$ , numa escala logarítmica. (c) Dependência térmica do calor específico por spin exatamente na região de transição entre as fases FAC -DAQ, em  $J_z = 1.0$  e  $J_x = 2.0$ , e quando  $J_z = 1.0$  e  $J_x = 1.9$ . . . . . 181
- 7.1 Geometria do modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  frustrado de Heisenberg. As linhas sólidas representam os acoplamentos  $J$  de Heisenberg dentro da célula unitária triangular e as linhas finas tracejadas correspondem às interações de Heisenberg  $J_1$  entre spins de diferentes células unitárias. . . . . 184
- 7.2 (a) Diagrama do estado fundamental para o spin- $\frac{1}{2}$  de Ising Heisenberg no plano  $\frac{J_1}{J} - \frac{h}{J}$ , onde todas as transições de fase energéticas são descontínuas. (b) Diagrama do estado fundamental para o spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg no plano  $\frac{J_1}{J} - \frac{h}{J}$ , onde quatro transições de fase possuem gaps e três transições são contínuas. (c) Uma ampliação do diagrama de fase do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg, que mostra a característica reentrante da linha de transição relativa à fase de spin- $\frac{3}{2}$ . As linhas grossas (finas) denotam uma transição de primeira ordem (segunda ordem). . . . . 187

- 7.3 Gráfico da magnetização normalizada com respeito ao valor de saturação em função do campo magnético  $\frac{h}{J}$  e da razão dos acoplamentos para  $\frac{J_1}{J}$  ilustrados em: (a) Modelo do tubo de Ising-Heisenberg; (b) Modelo do tubo de Heisenberg. . . . . 189
- 7.4 Emaranhamento quântico entre dois spins, definido pela função concorrência  $C$  como função do campo magnético  $\frac{h}{J}$  e da razão dos acoplamentos para  $\frac{J_1}{J}$  ilustrados em: (a) valor de  $C$  para spins situados dentro dentro da célula triangular, interligados pelo acoplamento  $J$ , no modelo do tubo de Ising-Heisenberg; (b) valor de  $C$  para spins situados em diferentes células triangulares, interligados pelo acoplamento  $J_1$ , no modelo do tubo de Heisenberg. . . . . 191
- 7.5 Gráfico das correlações dos spins  $C_{xx}$  e  $C_{zz}$  para os spins situados em diferentes células unitárias, interligados pelo acoplamento  $J_1$ , em função do campo magnético  $\frac{h}{J}$  e da razão dos acoplamentos  $\frac{J_1}{J}$  . . . . . 192

# Lista de Tabelas

5.1	A redução da dimensão do espaço de Hilbert para o modelo de Heisenberg numa rede quadrada com 40 sítios para $S = \frac{1}{2}$ . . . . .	112
-----	--	-----

# INTRODUÇÃO

## 1.1 Sistemas Magnéticos de Spin - Histórico

Pierre Weiss foi o pioneiro em tentar explicar qualitativamente a magnetização espontânea em materiais ferromagnéticos [2]. Na teoria do campo molecular de Weiss, imaginava-se que os momentos magnéticos interagem no interior de alguns compostos ferromagnéticos através de uma energia de interação tipo dipolo-dipolo. Mas essa suposição do termo de energia ser dipolar não é capaz de explicar os altos valores da temperatura crítica, onde surge uma quebra espontânea de simetria do sistema (transição ferromagnética-paramagnética).

Atualmente, sabe-se que em compostos magnéticos a interação dipolar certamente possui sua parcela de importância, porém, por ser extremamente fraca, ela sozinha não é capaz de explicar as propriedades magnéticas intensas de sistemas magnéticos. Por outro lado, compostos orgânicos apresentam baixos valores de suas temperaturas críticas, tornando a interação dipolar indispensável para caracterizar as propriedades magnéticas em compostos orgânicos.

Embora a teoria de Weiss seja capaz de reproduzir, qualitativamente, diversas propriedades magnéticas dos materiais ferromagnéticos, tais como:  $MnSb$ ,  $CrBr_3$ ,  $CrO_2$ ,  $CrTe$ ,  $EuO$ ,  $EuS$  e vários outros componentes químicos ferromagnéticos [3, 4], tal estudo, como dito anteriormente, possui algumas inconsistências em sua precisão quantitativa. Tais inconsistências se devem ao conjunto de princípios introduzidos para o comportamento qualitativo descrito por Weiss não se fundamentarem nos princípios propostos pela mecânica quântica para as interações eletromagnéticas na matéria, pois seus trabalhos são

anteriores à teoria de Niels Bohr para o modelo atômico.

Deste modo, a precisão quantitativa de sistemas magnéticos decorreu dos primeiros modelos que tentavam descrever, através da teoria quântica, as interações eletromagnéticas dos constituintes da matéria, interações estas mediadas pelos fótons e por uma das características intrínsecas dos elétrons, conhecida como o spin, juntamente com análises experimentais mais aprimoradas [5]. Os spins dos elétrons das camadas eletônicas  $d$  e  $f$  (quando estas estão com vacâncias) podem ser arrançados e se orientar das mais diversas formas e apresentar comportamentos distintos como paramagnetismo, diamagnetismo, ferromagnetismo e antiferromagnetismo [4]. Esses dois últimos tipos de comportamentos magnéticos se destroem em alta temperatura por efeito do aumento da agitação térmica, que desordena os domínios magnéticos do material.

As primeiras propostas quantitativas de modelos magnéticos de spin em redes para se estudar as propriedades magnéticas dos materiais se referem aos trabalhos de W. Lenz [6] e de seu orientando E. Ising [7], os quais introduziram e resolveram exatamente o modelo unidimensional do modelo estatístico originalmente criado para servir como uma descrição teórica de uma transição de fase magnética de materiais ferromagnéticos. Dentre os diversos modelos magnéticos, o modelo de Ising representa o mais simples e, ao mesmo tempo, o mais frequente modelo de estudo de fenômenos cooperativos em mecânica estatística [8].

O modelo de Ising pode ser usado para descrever os mais diversos sistemas físicos com variáveis binárias, como o gás de rede e a liga binária [9]. Em 1952, Yang e Lee [10] usaram o termo gás de rede para descrever um modelo em que  $M$  átomos podem ocupar aleatoriamente os  $N > M$  sítios. A cada par de sítios vizinhos ocupados dá-se uma energia  $E = E_0$ ; se num par vizinho faltar pelo menos um átomo tem-se  $E = 0$ . A interação tem a forma:  $-JS_i(S_{i+1} + S_{i-1})$ , sendo  $S_i$  a representação da variável binária de Ising: 0 na ausência de átomo ou 1 na presença de átomo. Hidrogênio adsorvido em uma superfície de ferro é um sistema que pode ser descrito por esse tipo de aproximação.

Já a liga binária consiste em dois tipos de átomos ocupando, aleatoriamente, os sítios de uma rede. Dependendo se os vizinhos são do mesmo tipo (mesmo átomo) ou não, se atribui energia diferente ao par. Neste caso, a variável binária de Ising,  $S_i$ , representa: 1 para o átomo tipo 1, enquanto  $S_i = 0$  representa o outro tipo. O sistema protótipo pode ser uma liga cobre-zinco [9].

Todavia a solução exata proposta por Ising, em 1925, refuta a existência de uma transição de fase à temperatura finita na cadeia linear de Ising de spin- $\frac{1}{2}$ . Sabe-se que a mesma conclusão foi erroneamente admitida para os modelos de dimensão maiores, 2D e 3D [7]. Esta conjectura incorreta suprimiu, significativamente, outras propostas teóricas mais aprofundadas do modelo criado por Ising durante as duas décadas seguintes, tornando-se um tópico de pesquisas de baixo interesse e abriu espaço para a modelagem matricial da interação dos spins, que apesar de ser mais complexa, tornou-se mais atrativa à época, ficando conhecidas como redes de spin de Heisenberg, propostas por Werner Heisenberg [11] e Paul Dirac [12].

Quase uma década depois, surgiu um novo artigo proposto por Bragg e Williams [13] no qual foi analisado o modelo de Ising utilizando uma aproximação de campo-médio. Eles se inspiraram num trabalho anterior de Gorsky [14]. Na aproximação de Bragg e Williams, a magnetização tende a zero de forma contínua, decaindo de acordo com uma lei de potência com a temperatura com um expoente  $\frac{1}{2}$  (expoente crítico). Este comportamento da magnetização do modelo de Ising, decaimento contínuo para zero com uma lei potências e o correspondente expoente crítico, é uma manifestação genérica de transição de fase (ferromagnética-paramagnética) de segunda ordem, ou contínua.

Todos os sistemas/modelos cujo parâmetro de ordem apresenta o mesmo comportamento crítico, no sentido do parâmetro de ordem ir a zero com um lei de potências caracterizada por um mesmo expoente, se diz estarem na mesma classe de universalidade.

Claramente a aproximação é exata apenas num limite  $d \rightarrow \infty$ , sendo  $d$  a dimensão do modelo. Uma séria crítica a essa aproximação surge do fato dela ser independente da dimensão  $d$  assumida, ocasionando assim uma transição de fase no modelo de Ising para uma temperatura finita  $T$  para qualquer dimensão  $d$ , algo que é claramente contraditório com a solução exata do modelo de Ising em uma dimensão.

No ano de 1931, Hans Bethe publicou um famoso artigo intitulado: "Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette" [15, 16] descrevendo a técnica do "Bethe ansatz" que foi construída para se encontrar o estado fundamental exato do modelo antiferromagnético quântico proposto por Heisenberg [11], para o caso unidimensional.

Em adição a essa técnica para solução de novos modelos de spin em redes, Bethe publicou outro artigo [15] expondo um aperfeiçoamento no modelo proposto por Bragg e

Williams que leva em consideração uma interação mais efetiva entre primeiros vizinhos. Observou-se que esta aproximação é de fato analiticamente exata para modelos unidimensionais. Contudo não prediz transição de fase para temperaturas finitas não-nulas quando aplicada para modelos bidimensionais ou de dimensões superiores, mas o modelo proposto por Bethe chega a prever processos de magnetização espontânea.

Em 1936, Peierls [17] publicou um artigo no qual defendeu uma nova abordagem fenomenológica que sustentava, ao contrário do que ocorre no caso unidimensional, a possibilidade do modelo de Ising bidimensional e tridimensional poder exibir magnetização espontânea em baixas temperaturas, sendo o primeiro a demonstrar que o modelo de Ising em duas dimensões apresenta transição de fase em temperatura não nula. Ou seja, a ordem de longo alcance que em uma cadeia linear de spins só era possível em temperatura nula persistia mesmo aumentando-se, levemente, a temperatura até uma dada temperatura crítica, acima da qual a ordem do sistema era destruída. A partir desse momento, o modelo criou certa euforia nos cientistas da época, pois agora ele dava esperanças de descrever uma transição de fase magnética.

Anos depois, Kramers e Wannier [18], encontraram a temperatura de transição  $T_c$  para o modelo de Ising numa rede quadrada. Neste mesmo ano, o fenômeno do antiferromagnetismo foi previsto por L. Néel [19]. De uma maneira minimalista, as estruturas magnéticas antiferromagnéticas podem ser considerados como subdivididos em duas sub-redes equivalentes que se interpenetram, de maneira que cada uma delas possua um momento magnético médio não-nulo, mas possuindo orientações individuais opostas e com magnitudes que se cancelam exatamente, sendo o momento magnético da rede nulo em qualquer temperatura.

Tal definição torna-se verdadeira apenas abaixo de uma certa temperatura, denominada temperatura de Néel. Acima da temperatura crítica, onde os efeitos da agitação térmica predominam, nem compostos ferromagnetos nem compostos antiferromagnetos apresentaram magnetização espontânea, passando estes a comportar-se como materiais paramagnéticos [4]. Esse comportamento é reflexo do efeito da competição entre as interações quânticas entre os domínios magnéticos microscópicos da matéria e a agitação térmica. Essa essência puramente quântica que dá origem à magnetização espontânea abaixo de uma certa temperatura crítica, que é consequência das competições entre as restrições impostas na função de onda pelo Princípio de Exclusão de Pauli e a repulsão

coulombiana [4].

Através do princípio de exclusão de Pauli, a função de onda total para sistemas fermiônicos, a qual depende das coordenadas espaciais e de spin que definem o sistema, deve ser anti-simétrica. Portanto, definindo a simetria de uma das partes, espacial ou de spin, a outra fica imediatamente determinada. De acordo com a simetria da parte espacial da função de onda fermiônica, os elétrons podem ficar mais distantes ou mais próximos. A energia potencial repulsiva coulombiana irá variar de acordo com a orientação relativa entre os spins dos pares de elétrons, assim sendo, os elétrons irão utilizar esse grau de liberdade adicional, devido a seus spins, para minimizar a interação coulombiana entre eles se acoplando aos pares, antiparalelos ou paralelos.

Apesar disso, o estudo dos modelos magnéticos de spin em redes teve seu ápice quando Onsager descobriu a solução exata do modelo de Ising em 2D na rede de spins retangular [20]. Um adendo curioso sobre o assunto é um fato que ocorreu após a Segunda Guerra Mundial: Hendrik Casimir escreveu uma carta a Wolfgang Pauli, expressando sua preocupação por estar tanto tempo afastado, durante os anos de guerra, do meio acadêmico e dos últimos avanços da física teórica de países aliados. Pauli em sua carta resposta disse que "nada muito de interesse aconteceu, exceto a solução exata de Onsager do modelo de Ising em duas dimensões" [8].

Antes de solução exata do Onsager, não era um consenso acadêmico se o formalismo estabelecido pela mecânica estatística podia ou não lidar com transições de fase. A solução estabelecida mostra sem dúvidas que as transições de fase aparecem como singularidades nas funções termodinâmicas e essas funções não precisam ter descontinuidades simples como foi postulado por Ehrenfest antes [21]. Nas quatro décadas seguintes, muitos resultados exatos foram derivados, o mais notável deles é o teorema de Mermin-Wagner [22]. Esse teorema demonstra que as flutuações de longo alcance podem ser criadas com pouco custo de energia e uma vez que aumentam a entropia, são favorecidas.

Outro ponto importante no estudo de sistemas magnéticos de spin com baixa dimensionalidade é que a curva de magnetização do modelo antiferromagnético nem sempre apresenta um contínuo crescimento, partindo do valor de saturação nulo, com o aumento do campo magnético externo.

Em certos sistemas, a curva exibe platôs em certos valores racionais da magnetização por sítio  $m$ . O fenômeno é análogo ao efeito de Hall quântico no qual a resistividade elé-



trica exhibe platôs como funções do campo externo magnético. Osgikawa e colaboradores [23] encontraram uma condição para a ocorrência dos platôs de magnetização em modelos quase unidimensionais pela generalização do exemplar "de Land surface model"[24], quando incluído o campo externo magnético. Para um sistema de spins qualquer, a condição de quantização pode ser escrita como:

$$(S_u - m_u)p \in Z \quad (1.1)$$

onde  $p$  é o período do estado fundamental,  $S_u$  e  $m_u$  são o spin total e a magnetização total da célula unitária. De acordo com essa regra, o número de platôs disponíveis pode ser aumentado tanto pelo aumento do spin total na célula unitária  $S_u$  quanto pela quebra da simetria de translação, pelo aumento de  $p$ . A condição de quantização é necessária mas não suficiente, pois nem todos os platôs previstos são obtidos em geral.

Quarenta anos atrás, pesquisas em sistemas magnéticos de baixa dimensão voltaram a receber muita atenção, depois da descoberta dos supercondutores de alta temperatura [25], cuja descrição teórica completa ainda representa um campo em aberto na física. A saída torna-se partir para a busca empírica por sistemas de spins que exibem o comportamento de supercondutividade em alta temperatura, já que não existe uma teoria completa para este fenômeno. Os Cupratos são compostos que podem exibir o fenômeno da supercondutividade de alta temperatura. Nesses compostos químicos, a dinâmica dos portadores de carga é proeminente nos planos  $CuO_2$ . A liga  $La_{2-x}(Sr, Ba)_xCuO_4$  é um exemplo de supercondutor formado por planos  $CuO_2$  [25].

Até hoje, o estudo de modelos quânticos e/ou clássicos de spin, continua sendo objeto de interesse de diversos pesquisadores, sobretudo devido a sua grande capacidade para prever e reproduzir resultados experimentais nos mais diversos sistemas físicos.

## 1.2 Motivações Tecnológicas

Modelos quânticos exatamente solúveis são importantes na física da matéria condensada e no estudo da comunicação e informação quântica, uma vez que produzem, frequentemente, novas informações em aspectos relacionados a fenômenos cooperativos que seriam difíceis de serem compreendidos através de outras abordagens [26, 27, 28]. Apesar

dos esforços consideráveis, uma solução completa e rigorosa para a maioria dos sistemas realísticos de spin quânticos encontra-se além do presente estágio do atual avanço científico.

Como mencionado anteriormente, um dos pontos cruciais na utilização de modelos exatamente solúveis de spins quânticos reside no campo de informação e computação quântica, onde os modelos têm fornecido um novo cenário para o desenvolvimento e teste de novas formas de caracterizar emaranhamento quânticos e a não-localidade dos graus de liberdade e estados que compõem os sistemas físicos reais [29]. As medidas de emaranhamento quântico que podem ser obtidas através de alguma propriedade termodinâmica oferecem uma possibilidade intrigante para testes experimentais [30].

A presença dos materiais magnéticos em nossas vidas é observada desde os pequenos ímãs dos fones de ouvido até a memória de HD do computador. Devido à grande demanda comercial por novas matérias magnéticas ocorre a impulsão das pesquisas de transições de fase em sistemas magnéticos reais. Diversos materiais magnéticos reais foram se apresentando como candidatos razoáveis para serem mapeados analiticamente por modelos de spins em redes finitas, inclusive por sistemas matematicamente simples [27], como o modelo de Ising, onde os momentos magnéticos possuem uma direção preferencial de ordenamento [11]. Contudo, materiais magnéticos reais, em sua maioria, são extremamente frustrados pelos diversos tipos de interações presentes entre os spins que formam sua estrutura química básica [4].

A frustração geométrica é uma característica que impede, por exemplo, a formação "perfeita" de um cristal, quando se tem uma pequena quantidade de átomos de determinada substância, resultado em pequenas imperfeições, em função da estrutura geométrica. A existência de modelos frustrados, também, está presente em sistemas de spin. A palavra "frustração" foi introduzida para descrever a situação em que um spin (ou um número de spins) no sistema não pode encontrar uma única orientação para satisfazer plenamente todas as interações com seu spin vizinho [27].

Durante as primeiras tentativas de se criar um paralelo entre os modelos teóricos em redes de spin e os compostos químicos magnéticos reais, a maior parte das investigações concentravam-se em compostos químicos com íons  $Cu^{+2}$  que representavam spins- $\frac{1}{2}$  ou com íons  $Ni^{+2}$  que representam spins-1. Entre as cadeias de spin fracionário, onde nosso particular interesse reside em redes de spin- $\frac{1}{2}$ ,  $CuCl_2 \cdot 2NC_5H_5$  é tido como a primeira

cadeia quântica que foi investigada experimentalmente [31].

Pensando em uma representação mais minimalista para descrever os componentes químicos reais, pode-se propor três principais condições para que uma substância magnética seja mapeada e descrita como um modelo tipo Ising:

1. A interação dominante entre os íons magnéticos, que governará o comportamento magnético, deverá ser de curto alcance [4].
2. O estado fundamental dos íons magnéticos deverá ser um doubleto, o qual é bem separado na energia de todos os outros estados excitados (normalmente, íons magnéticos com estado fundamental tipo doubleto de Kramer [32]).
3. Não deverá haver acoplamento quântico entre estados mutuamente interagentes dos íons magnéticos. [33].

Existem duas famílias de materiais isolantes que podem apresentar as propriedades apresentadas acima. A primeira classe dos materiais magnéticos tipo Ising são os compostos químicos conhecidos como terras raras, que contém seus momentos magnéticos dos íons (como  $Dy^{3+}$ ,  $Ho^{3+}$ ,  $Tb^{3+}$ , etc.), interagindo entre eles mesmo basicamente através de forças de dipolo [27]. Embora a interação magnética de dipolo-dipolo seja em essência uma interação de longo alcance, a interação dipolar entre os íons terras raras mais afastados entre si podem ocasionalmente se cancelar.

Sob estas circunstâncias, desconsiderando efeitos eletromagnéticos mais complexos, pode-se considerar as interações dipolo-dipolo dos íons terras raras apenas entre os íons que forem primeiros vizinhos, desconsiderando as interações de longo alcance. Esta consideração mostra-se satisfatória de acordo com diversos experimentos realizados [34].

A segunda classe de materiais magnéticos tipo Ising é representada por estruturas químicas chamadas compostos de coordenação [35]. A interação mais importante entre os centros magnéticos (íons típicos de metais de transição) é a interação de troca, que é intermediada via intervenção de ligantes não magnéticos e sendo extremamente de curto-alcance. No entanto, a interação de Ising mais anisotrópica entre os centros magnéticos pode ser obtida apenas para os íons magnéticos com uma força de interação spin-órbita suficiente e/ou uma anisotropia do campo cristalino como, por exemplo, íons tipo  $Co^{2+}$  e  $Fe^{3+}$ . Essa condição específica representa a mais importante limitação para um metal de transição ser identificado como um material tipo Ising [34].

Embora todos os compostos magnéticos moleculares sejam essencialmente estruturas em três dimensões, como os demais sistemas reais, grande parte deles pode ser efetivamente mapeada em modelos quânticos de spin em uma dimensão, devido à negligência das fracas interações nas outras duas dimensões espaciais [5]. O modelo de Heisenberg unidimensional apresenta efeitos quânticos mais proeminentes em comparação aos modelos de dimensões superiores por causa do aumento das flutuações quânticas dos spins que a redução na dimensionalidade impõe [36].

Redes antiferromagnéticas de spins- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg de duas dimensões, por exemplo, têm sido alvo de grande interesse, uma vez que se descobriu supercondutividade a altas temperaturas para alguns compostos formados de óxidos de cobre [4]. Para os sistemas unidimensionais, por sua vez, é investigada a conjectura de Haldane, que diz que cadeias de spins semi-inteiros apresentam gap singleto-triplete enquanto que o mesmo não se observa em cadeias de spin inteiros [23].

Entre as atuais realizações experimentais dos modelos de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$  deve-se fazer referência aos compostos químicos  $KCuF_3$  e  $Sr_2CuO_3$ . Outro composto químico antiferromagnético quase unidimensional é o  $CuGeO_3$ , tido como o primeiro material inorgânico de spin-Peierls [37]. O protótipo de material escada com spin- $\frac{1}{2}$  é o  $Sr_xCu_yO_z$ . O componente químico  $Sr_xCu_yO_z$  não serve apenas como modelo experimental para materiais escada com duas cadeias,  $SrCu_2O_3$ , mas também para redes com mais de duas cadeias,  $Sr_2Cu_3O_5$  [38].

Vários compostos formados por óxidos de vanádio [5] podem ser descritos de forma teórica pelo modelo de Heisenberg antiferromagnético, com interações de primeiros e segundo vizinhos, onde seu estado fundamental é colinear, como por exemplo  $VOMoO_4$  e  $BaCdVO(PO_4)_2$ . O modelo de Heisenberg, além de descrever esses compostos, vem sendo um amplo motivador do estudo de materiais supercondutores.

Dentre os vários modelos de redes de spin para descrever sistemas físicos reais já discutidos, um modelo promissor e de particular interesse é o modelo da escada de spins. O modelo tubo de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$  tem recentemente atraído bastante atenção [39, 40, 41]. O termo tubo de spin, geralmente, se refere a um modelo de spin escada com  $n$ -pernas ( $n \geq 3$ ) e com condições periódicas entre as  $n$  ligação internas, essa região de ligações periódicas é chamada de degrau. O acoplamento antiferromagnético entre os degraus, obviamente, causa uma frustração de spin geométrica sempre que o tubo

tiver um número de ligações periódicas ímpar. Conhecendo esse fato, o tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg possui um gap no seu espectro de excitação de spin em contraste com a escada com três pernas de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg com condições de contorno abertas nos degraus [42].

A presença de gap nos estados de excitação é algo corriqueiro em sistemas de spin. O gap ocorre não devido às anisotropias existentes no sistema, mas por efeitos quânticos das interações entre os spins da rede [43]. O teorema de Lieb-Schultz-Mattis [44] sugere que o gap dos spins deve ser acompanhado com uma dupla degenerência do estado fundamental com uma quebra espontânea de simetria desde que a célula unitária consista de três spins. Do ponto de vista experimental, os polímeros de coordenação unidimensionais  $[(CuCl_2tachH)_3Cl]Cl_2$  (tach = 1,3,5-triamina ciclohexano)[45] e  $Cu_2Cl_4 \cdot D_8C_4SO_2$ [46] representam compostos químicos que podem ser descritos pelos modelos spin- $\frac{1}{2}$  tubo de Heisenberg com três pernas e com quatro pernas, respectivamente. Entretanto as realizações experimentais do modelo frustrado do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg não mostraram nenhum platô de magnetização, desde que as interações internas dos degraus eram muito maior que as ligações entre os triângulos [45].

Outro aspecto interessante do tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg é a quiralidade dos spins. Tem sido demonstrado que a frustração geométrica pode causar uma quiralidade de spin na presença de um campo magnético fraco ou um exchange anisotrópico [47].

Fora as motivações tecnológicas descritas, voltadas às aplicações diretas dos modelos de spin para descrever os comportamentos eletromagnético quântico de componentes químicos, os modelos magnéticos de spin também possuem as mais diversas aplicações relacionadas com sistemas cooperativos de interação de muitas partículas. Para exemplificar a imensa variedade de aplicações, podemos citar os trabalhos nas áreas de: análise de séries temporais do mercado financeiro [48], segregação urbana [49], alternâncias eletromecânicas das células cardíacas [50] e também na análise de mudanças linguísticas [48].

### 1.3 Apresentação Geral do Trabalho

Nesta tese, estudaremos as propriedades magnéticas e térmicas, de um modelo conhecido como tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  frustrados, e as correlações quânticas e as transições de fase, nas formas clássica e quântica. O modelo é dividido em dois casos: Ising-Heisenberg, quando as interações entre spins de células triangulares diferentes são consideradas de Ising; e o modelo de Heisenberg, quando as interações são consideradas de Heisenberg. A análise do emaranhamento quântico no modelo exatamente solúvel não se restringe unicamente ao ponto de vista teórico. Existe uma variedade de componentes químicos que retêm estruturas magnéticas semelhante a uma escada de spin tipo três pernas. Isso pode ser visto na análise experimental de polímeros de coordenação unidimensionais, como o  $[(CuCl_2tancH)_3Cl]Cl_2$  (tach = 1,3,5-triamina ciclohexano)[45].

A tese irá contemplar a análise das diversas correlações quânticas e clássicas, por meio da frustração geométrica da rede e da aplicação de um campo externo no modelo spin quântico frustrado, representado por escada de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg e de Heisenberg com três pernas. Para tal fim, estendemos o alcance da análise das correlações quânticas em novos sistemas de spins quânticos que possam explicar comportamentos experimentalmente observados em alguns materiais magnéticos e/ou possam teoricamente prever novos fenômenos quânticos e cooperativos de fundamental importância em sistemas reais.

Para um melhor entendimento deste trabalho, no próximo capítulo serão abordadas as principais descrições de modelos de spins em redes e ordenamentos magnéticos. Será feita uma contextualização histórica, explicado a relação entre as interações de troca e o magnetismo na matéria, bem como uma revisão teórica dos principais métodos matemáticos para solução dos modelos de Ising e de Heisenberg. Também serão discutidos alguns efeitos que a frustração geométrica e emaranhamento causam nos processos de magnetização como: efeito magnétocalórico e platôs de magnetização.

No capítulo 3, será introduzido o conceito de emaranhamento quântico. Abordaremos os processos de decomposição e formação de estados. Introduziremos o conceito de não-localidade causal, e como este conceito pode ser medido através da desigualdade de Bell. Abordaremos os principais quantificadores do emaranhamento de formação dos estados, em especial o conceito de concorrência.

No capítulo 4, será apresentado o método do grupo de renormalização clássico, que introduziu os conceitos de renormalização: escalonamento, formação de blocos e trunca-

gem de estados. Conceitos que puderam ser estendidos para uma abordagem mais geral, que descreve sistema de spins quanticamente correlacionados. Essa expansão ficou conhecida como grupo de renormalização da matriz de densidade (DMRG, do inglês). Será apresentado o formalismo das teorias de bandas de energia que modelam as teorias de impurezas magnéticas diluídas.

No capítulo 5, é voltado para o estudo da técnica do grupo de renormalização da matriz de densidade: seu surgimento e subdivisão em duas sub-técnicas: algoritmo infinito e algoritmo finito. Será mostrado uma aplicação da técnica de DMRG para o modelo 1D antiferromagnético de Heisenberg. Mostraremos também como é feito o cálculo dos observáveis no DMRG, especificamente apresentando um método alternativo para se calcular a magnetização local.

N capítulo 6 iremos introduzir o primeiro modelo de estudo desta tese: o tubo triangular de spin de Ising-Heisenberg, bem como a análise de suas propriedades termodinâmicas e de emaranhamento quântico. As contribuições associadas à magnetização total do sistema e suas propriedades termodinâmicas, onde iremos analisar sua entropia, calor específico e taxa magnetocalórica, para diversos valores de parâmetros que caracterizam o modelo do tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$ . A conexão entre as funções termodinâmicas e as propriedades do estado fundamental serão analisadas.

Em nosso capítulo 7, será apresentado o segundo modelo de estudo desta tese: o tubo triangular de spin de Heisenberg puro, junto às motivações teóricas que levaram a sua realização. A partir da aplicação da técnica do DMRG nessa cadeia puramente quântica, foi possível se obter os espectros de energia, magnetização local, correlações quânticas entre os spins e fazer uma análise de emaranhamento quântico e não localidade neste modelo. Por fim, serão mostradas as principais conclusões do trabalho, assim como as perspectivas de realizações de novos trabalhos.

Os principais resultados produzidos por este trabalho de tese foram publicados recentemente em [36, 51, 52].

# MODELOS MAGNÉTICOS EM REDES DE SPIN

## 2.1 Contextualização Histórica

Como referido no capítulo anterior, modelos magnéticos de spin- $\frac{1}{2}$  evoluíram juntamente com o desenvolvimento da mecânica quântica, por meio de duas conquistas teóricas inovadoras: Primeiro, a introdução do modelo de Ising em uma dimensão em 1929 [7], e segundo, o cálculo exato do estado fundamental do modelo de Heisenberg em uma dimensão através do ansatz de Bethe 1931 [15].

A descrição quântica de materiais que apresentam propriedades magnéticas, proposta no modelo de Heisenberg [11], assume que a principal contribuição para o forte magnetismo da matéria tem sua origem nas interações quânticas e na termodinâmica dos agrupamentos de spin, dos elétrons pertencentes aos átomos que formam o material.

Uma das explicações vindas de Heisenberg [11] dizia que: o alinhamento dos spins decorria de seus vizinhos mais próximos. Interações eletrostáticas entre elétrons desemparelhados dos orbitais mais externos de íons adjacentes, quando vista pela teoria da perturbação, produz uma separação dos níveis energéticos eletrônicos, que pode ser entendida como a quantidade de energia necessária para trocar os elétrons dos átomos vizinhos.

Os modelos com impuças magnéticas diluídas foram os primeiros modelos em redes de spin ao qual foram aplicadas as técnicas de grupo de renormalização, que culminaram no completo entendimento das transições de fase em modelos magnéticos em redes de spins [53, 54]



Com base nessas ideias, a presente seção irá se debruçar sobre uma revisão dos conceitos básicos para o tratamento exato e/ou aproximado de modelos teóricos de redes de spin- $\frac{1}{2}$ , dando ênfase aos casos unidimensionais dos modelos de Ising e Heisenberg, com interação de primeiros vizinhos. Introduziremos os conceitos de grupos de renormalização analisando os modelos com impurezas magnéticas diluídas, mostrando a relação destas descrição de impurezas com os modelos de Ising e Heisenberg. Além disso, faremos uma revisão nos métodos de solução exata, solução aproximada via campo molecular aplicados ao modelo de spin- $\frac{1}{2}$ . Mostraremos também a solução exata para o modelo de Heisenberg unidimensional de spin- $\frac{1}{2}$ . Por fim, iremos apresentar uma discussão sobre alguns modelos de spin frustrados, que podem apresentar platôs de magnetização e efeito magnétocalórico intensificado.

## 2.2 Interação de Troca e o Magnetismo

Partindo-se de primeiros princípios, os modelos magnéticos devem ser descritos utilizando-se as propriedades da mecânica quântica, visto que sistemas puramente clássicos, em equilíbrio termodinâmico, não apresentam momentos magnéticos. Esses momentos magnéticos possuem três origens: o spin do elétron e o momento angular orbital em torno do núcleo, que fornecem contribuição paramagnética, e a variação no momento orbital induzida pela aplicação de um campo magnético, que origina uma contribuição diamagnética.

Uma das maneiras mais simples de entender as interações entre spins originárias das forças de Coulomb é se estudar um sistema formado por dois elétrons, proposto por Heitler e London em 1927 [55]. Nesse modelo simples, composto por dois átomos de hidrogênio infinitamente separados, cada elétron só pode interagir com o próton em sua vizinhança. Dessa maneira, podemos separar o Hamiltoniano como a soma de Hamiltonianos de uma variável, que envolvem apenas as coordenadas espaciais de cada elétron, da seguinte forma:

$$\mathcal{H}_0\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2) = (\vec{h}_1 + \vec{h}_2)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2) = E_0\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2), \quad (2.1)$$

sendo

$$\vec{h}_i = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_i|} \quad (2.2)$$

onde  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$  são as coordenadas dos elétrons e  $\vec{R}_1$  e  $\vec{R}_2$  são as coordenadas dos núcleos.

Considerando que os núcleos são muito mais pesados que os elétrons é razoável dizer que os núcleos estão quase fixos com respeito ao movimento dos elétrons. Pode-se fixar  $\vec{R}$ , a configuração nuclear, em um conjunto de valores  $\{\vec{R}_1, \vec{R}_2\}$  e resolver o Hamiltoniano com relação às variáveis dos elétrons. Desta forma a autofunção eletrônica  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2)$  irá depender só parametricamente de  $\vec{R}$ . Por essa razão, a dependência das coordenadas dos núcleos será omitida em inúmeras deduções a seguir.

As funções de onda do estado fundamental dos Hamiltonianos de um elétron satisfazem a equação:

$$\vec{h}_i \phi_i(\vec{r}_i) = \epsilon_0 \phi_i(\vec{r}_i) \quad (2.3)$$

Como consequência do Hamiltoniano do sistema ser uma soma de Hamiltonianos de um elétron, podemos escrever a função de onda total como um produto das funções de onda de cada Hamiltoniano individual. No entanto devemos lembrar que pelo princípio de Pauli a função de onda do sistema deve ser anti-simétrica. Portanto, a função de onda será escrita como uma combinação linear dos produtos das funções de onda dos Hamiltonianos individuais,

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2) = \left( \phi(\vec{r}_1, \vec{R}_1) \phi(\vec{r}_2, \vec{R}_2) - \phi(\vec{r}_1, \vec{R}_2) \phi(\vec{r}_2, \vec{R}_1) \right). \quad (2.4)$$

Na eq. 2.4 a dependência das coordenadas dos núcleos foi deixada explícita para enfatizar que o primeiro e o segundo termos da função de onda estão centrados em posições diferentes. Enquanto os átomos estiverem bem afastados, a restrição imposta pelo princípio de Pauli na função de onda é irrelevante, pois o último termo da função de onda é muito pequeno. Nesse limite uma boa aproximação para a função de onda será:

$$\psi = \phi_1(\vec{r}_1, \vec{R}_1) \phi_2(\vec{r}_2, \vec{R}_2). \quad (2.5)$$

Na medida que o espaçamento entre os prótons se torna menor,  $\vec{R}_2 - \vec{R}_1$ , o último termo da função de onda  $\psi$  da 2.4 se torna relevante. As aproximações em que não existe interação entre os elétrons e nem interação entre o elétron em um átomo com o núcleo do outro, não podem ser mais utilizadas.

O Hamiltoniano do sistema quando os dois átomos estão próximos será expresso por:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_i, \quad (2.6)$$

onde

$$\mathcal{H}_i = e^2 \left( \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \frac{1}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_2|} + \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_1|} \right). \quad (2.7)$$

Quando os prótons se aproximam, os níveis de energia que eram degenerados se abrem devido a interação entre os átomos. A abertura dos níveis devido à interação entre os átomos é pequena comparada com todas as outras excitações de energia do sistema de dois elétrons. Sob essas condições, podemos representar então o sistema de duas partículas por um simples sistema de quatro estados (duas direções de spin), o qual é o subespaço de menor energia da molécula  $H_2$ .

A partir de deste ponto, vamos calcular a correção na energia devido à interação coulombiana entre os átomos utilizando a teoria de perturbação de primeira ordem.

A correção de primeira ordem para a energia é simplesmente o valor médio do termo de interação nos estados não perturbados. Assim, temos:

$$E = E_0 + \int \psi^* \mathcal{H}_i \psi. \quad (2.8)$$

Se utilizarmos a função de onda da Eq. 2.5, o termo de correção será

$$U = \int \left[ \phi_1^*(\vec{r}_1) \phi_2^*(\vec{r}_2) \right] \mathcal{H}_i \left[ \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) \right] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (2.9)$$

Este termo tem a interpretação física de ser a interação média de Coulomb entre os átomos, denominado termo direto. Este resultado, contudo, foi obtido sem considerar o princípio de Pauli. O princípio de Pauli requer que a função de onda total seja anti-simétrica pela troca das coordenadas de spin e espacial. As coordenadas de spin deverão ser incluídas explicitamente na função de onda, apesar do Hamiltoniano não depender de spin, pois os elétrons (férmions) utilizam os graus de liberdade de spin como uma maneira para minimizar suas energias.

O Hamiltoniano comuta com os operadores de spin, sendo possível escolher uma base de autofunções em comum com  $\vec{S}^2$  e  $\vec{S}_z$ . Podemos escrever então a função de onda total como o produto da autofunção de spin e da auto função espacial. As auto funções espaciais normalizadas, anti-simétricas e simétricas, do Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  são, respectivamente:

$$\begin{aligned}\Phi_A &= \frac{1}{\sqrt{2(1+l^2)}} \left( \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) - \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1) \right); \\ \Phi_S &= \frac{1}{\sqrt{2(1-l^2)}} \left( \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) + \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1) \right)\end{aligned}\tag{2.10}$$

onde

$$l^2 = \int \left[ \phi_1^*(\vec{r}_1)\phi_2^*(\vec{r}_2) \right] \left[ \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1) \right] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2\tag{2.11}$$

é a integral de sobreposição da função de onda.

À medida que as duas partículas se aproximam, a função anti-simétrica vai a zero, ou seja,  $\Phi_A \rightarrow 0$ . Portanto, é improvável que partículas no mesmo estado anti-simétrico sejam encontradas próximas umas das outras. Por outro lado, quando os átomos estão infinitamente afastados  $l^2$  é nulo.

As possíveis combinações, estruturadas sobre a condição da função de onda total ser anti-simétrica, são:

$$\begin{aligned}\Psi_0 &= \frac{1}{\sqrt{2(1+l^2)}} \left( \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) + \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1) \right) \chi_0; \\ \Psi_{1,j} &= \frac{1}{\sqrt{2(1-l^2)}} \left( \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) - \phi_1(\vec{r}_2)\phi_2(\vec{r}_1) \right) \chi_{1,j}.\end{aligned}\tag{2.12}$$

onde  $j = 1, 0$  ou  $-1$ .

Devemos lembrar que as funções de onda, dadas na eq. 2.12, são soluções com energias degeneradas. Quando nós calculamos a correção de energia em primeira ordem na teoria de perturbação, encontramos:

$$\begin{aligned}
 E^{(0)} &= \langle \psi_0 | \mathcal{H} | \psi_0 \rangle = \int \psi_0^* \mathcal{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_0 = 2\epsilon_0 + \frac{U + V}{1 + l^2} \\
 E^{(1)} &= \langle \psi_1 | \mathcal{H} | \psi_1 \rangle = \int \psi_1^* \mathcal{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_1 = 2\epsilon_0 + \frac{U - V}{1 - l^2},
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

onde  $E^{(0)}$  e  $E^{(1)}$  são as energias do estado fundamental, quando a autofunção de spin assume os estados singleto e tripleto sendo, respectivamente:

$$V = \int \left[ \phi_1^*(\vec{r}_1) \phi_2^*(\vec{r}_2) \right] \mathcal{H}_i \left[ \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) \right] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \tag{2.14}$$

que representa a energia de troca de um elétron entre dois átomos. O termo  $V$  é o elemento da matriz da interação de Coulomb tomado entre o estado no qual o elétron 1 está acoplado com o núcleo 2 e o elétron 2 é acoplado com um núcleo 1. A energia de troca decresce rapidamente (comparando com o termo direito) com o aumento da distância entre os prótons.

Quanto à parte de spin, a álgebra de momentos angulares para dois spins- $\frac{1}{2}$  nos fornece quatro estados caracterizados pelo seu spin total  $S$ :

$$S = 0 \quad \Rightarrow \quad \textit{Singletos} : \quad |\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \right); \tag{2.15}$$

$$S = \hbar \quad \Rightarrow \quad \textit{Tripletos} : \quad |\phi_1\rangle = \left\{ |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle \quad e \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \right) \right\}. \tag{2.16}$$

Se o estado fundamental é singleto  $|\phi_0\rangle$  ou tripleto  $|\phi_1\rangle$  será determinado pelo estado que apresentar o valor mais baixo de energia. Desta forma, o valor do gap de energia, causado pela interação, é expresso por:

$$E^{(0)} - E^{(1)} = \frac{2l^2U - 2V}{1 - l^4} = -J, \tag{2.17}$$

onde  $J$  é denominado de parâmetro de troca.

Como pôde ser visto, a interação de troca que tem sua origem na teoria quântica, sendo responsável pelo ordenamento magnético na matéria. Apesar de não ser capaz de definir alguma orientação dos momentos magnéticos em função dos eixos cristalográficos,

por ser de natureza isotrópica, produz um ordenamento mútuo dos spins em vários sítios da rede.

A interação de troca, entre duas partículas  $a$  e  $b$  com raios das camadas incompletas,  $r_a$  e  $r_b$ , respectivamente, e com uma separação dos átomos,  $r_{ab} = |r_a - r_b|$ , é dada por:

$$J = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \phi_a^*(r_a)\phi_b^*(r_b) \frac{1}{r_{ab}} \phi_a(r_b)\phi_b(r_a) d^3r_a d^3r_b, \quad (2.18)$$

onde  $\phi$  é a função de onda da respectiva partícula. A interação de troca entre dois momentos de spins vizinhos surge da sobreposição dos orbitais magnéticos entre dois átomos adjacentes. Se  $J > 0$  temos que  $E^{(1)} > E^{(0)}$  e, portanto, o estado fundamental será singleto.

A energia de troca  $J$  tem a propriedade de decrescer rapidamente com a distância entre os íons (decaimento exponencial), em contraste com a interação coulombiana que decresce mais lentamente ( $\approx \frac{1}{r}$ ). A razão é que  $J$  contém um produto de funções de onda de elétrons ligados em núcleos diferentes, portanto  $J$  dependerá do envolvimento das funções de onda, e este envolvimento descrece exponencialmente com a distância. Desta maneira, a interação de troca corresponde a uma interação de curto-alcance, em contraste com a interação dipolar que é de longo alcance ( $\approx \frac{1}{r^3}$ ). Se o sinal do parâmetro de troca é negativo, o sistema apresenta um comportamento ferromagnético, ou seja, seus spins se alinham paralelamente. Quando este é positivo, o sistema apresenta um comportamento antiferromagnético, ou seja, seus spins se alinham anti-paralelamente.

O eixo fácil de magnetização representa a orientação numa dada direção da distribuição de spins ordenados, definida com respeito ao eixo cristalino. Pode-se, assim, incluir novos termos de interação que transforme o Hamiltoniano de Heisenberg num modelo anisotrópico, como, por exemplo, um termo dipolar proporcional à  $\frac{(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{S}_i)(\vec{r}_{ij} \cdot \vec{S}_j)}{r_{ij}^3}$ .

Na prática, as interações magnéticas (dipolar, quadrupolar, etc) são essenciais para existência da anisotropia magnetocristalina, que se manifesta com a dependência da energia do cristal na orientação dos momentos magnéticos dos íons com relação ao eixo cristalino. Podemos dizer que num cristal existem campos magnéticos efetivos internos que tendem a orientar os momentos magnéticos em um dada direção privilegiada. Este campo pode alterar algumas vezes as orientações mútuas dos momentos magnéticos dos átomos, distorcendo a estrutura magnetocristalina.

Interessante notar que o magnetismo dos elementos de transição, do grupo 8 da tabela periódica é sempre associado ao momento magnético dos spins. Isto ocorre porque nos cristais, formados por elementos do grupo 8, o campo cristalino geralmente remove as degenerescências orbitais dos estados eletrônicos responsáveis pelas propriedades magnéticas dos compostos.

Os compostos magnéticos isolantes reais são, com raras exceções, antiferromagnéticos [56, 57]. O estado fundamental ferromagnético corresponde a todos os spins alinhados paralelamente. Entretanto, o estado fundamental deste mesmo Hamiltoniano, para o caso antiferromagnético, não corresponde necessariamente a todos os spins intercalados antiparalelamente (estado Néel) [58]. O estado de Néel não é a única possibilidade de configuração para o estado fundamental do Hamiltoniano antiferromagnético. Este depende da geometria e dos valores escolhidos para acoplamentos antiferromagnéticos, pois existe uma infinidade de estados de spin total nulo ( $S^z = 0$ ), que devem ser combinados para formar o estado fundamental do sistema [3]. A diferença em estabelecer um estado fundamental é o maior atrativo teórico que surge no estudo do modelos antiferromagnéticos de Heisenberg [56].

A análise qualitativa de outros casos pode ser realizada partindo de uma escolha diferente para  $\mathcal{H}_i$  do Hamiltoniano da eq. 2.6 como, por exemplo, o caso do preenchimento de uma subcamada atômica. Neste caso,  $\vec{R}_1 = \vec{R}_2$  e, dessa forma, os Hamiltonianos,  $h_1$  e  $h_2$ , serão idênticos e  $V$  será a repulsão coulombiana entre os elétrons. Se a camada não for degenerada, como os orbitais  $s$ , o estado singleto será o de menor energia. Para construir o Hamiltoniano de dois spins de forma que represente o sistema de dois elétrons, deve-se escrever as relações de comutação do operador de spin do elétron:

$$\vec{S}_i^2 \psi_i = S_i(S_i + 1)\psi_i = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2}\right) \psi_i = \frac{3}{4} \psi_i. \quad (2.19)$$

Portanto, o operador de spin total,  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ , satisfaz:

$$\vec{S}^2 \psi_i = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = \frac{3}{2} + 2(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2), \quad (2.20)$$

onde o produto escalar dos operadores de spin,  $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ , será igual a :

1.  $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = -\frac{3}{4}$ , no estado singlete ( $S = 0$ );
2.  $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{4}$ , no estado tripleto ( $S = 1$ ).

Podemos, então, reescrever o operador "produto escalar" da seguinte maneira:

$$\mathcal{H}^{spin} = \vec{S}^2 = \frac{1}{4}(E^0 + 3E^1) - (E^0 - E^1)(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2). \quad (2.21)$$

O estado fundamental será ferromagnético ou antiferromagnético, dependendo do valor do produto escalar entre os spins. Pode-se omitir a constante comum para os quatro estados, redefinindo o zero da energia do sistema, e escrever o Hamiltoniano da eq. 2.21 como:

$$\mathcal{H}^{spin} = \vec{S}^2 = -(E^0 - E^1)(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) = J(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2). \quad (2.22)$$

O Hamiltoniano de spin da equação 2.22 possui, em uma forma minimalista, informação sobre a abertura dos níveis de energia.

Com base na mesma argumentação para construção do Hamiltoniano de dois átomos, podemos escrever o Hamiltoniano para  $N$  átomos. Quando os  $N$  átomos de spins  $S$  estão separados, o estado fundamental será  $(2s-1)N$  vezes degenerado, e os níveis de energia se abrem à medida que a distância entre os átomos diminui. A abertura dos níveis será muito menor que qualquer outra energia de excitação e por isso podemos utilizar o Hamiltoniano de spin para descrever a abertura dos níveis do estado fundamental degenerado.

Podemos construir uma função de operadores que represente a abertura dos níveis de energia. A forma do Hamiltoniano de spin será simplesmente a forma do caso de dois spins,

$$\mathcal{H}^{spin} = \sum_{ij} J_{ij}(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j), \quad (2.23)$$

onde  $J_{ij}$  é a interação de troca entre o sítios  $i$  e o sítio  $j$ . Com relação ao Hamiltoniano de spin, é interessante notar que:



1. Para aparecer somente produtos de pares de operadores de spin no Hamiltoniano, é necessário que todos os átomos estejam suficientemente distantes para que a sobreposição da função de onda de seus elétrons seja pequena.
2. Quando o momento angular de cada elétron tiver uma parte angular e uma parte de spin, o acoplamento no Hamiltoniano de spin poderá depender da orientação de spin absoluta, bem como da relativa.

Para considerar os efeitos de anisotropia acrescentamos no Hamiltoniano um segundo termo que irá considerar a interação dos spins com o campo magnético externo  $\vec{H}$ , sendo assim:

$$\mathcal{H}^{spin} = \sum_{ij} J_{ij}(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) + g\mu_B \vec{H} \cdot \sum_i \vec{S}_i \quad (2.24)$$

onde  $g$  é a razão giromagnética e  $\mu_B$  é o magnéton de Bohr. O Hamiltoniano da equação 2.24 é conhecido como Hamiltoniano de Heisenberg, ponto de partida para teorias de magnetismo em isolantes, onde os elétrons são localizados.

Para o caso em que consideramos apenas a componente  $S^z$ , ao invés do vetor tridimensional de spin  $\vec{S}$ , o modelo de Heisenberg se reduz ao modelo conhecido como modelo de Ising. O modelo de Ising corresponde, do ponto de vista fenomenológico, ao limite de Heisenberg anisotópico, no qual  $J_{ij}^z \gg (J_{ij}^x, J_{ij}^y)$ .

Como o único tipo de interação que atua no sistema de Ising a campo nulo é a interação de Coulomb direta entre spins dos dois íons, esse tipo de interação é comumente chamado de modelo de troca direta [44]. Contudo a interação entre dois átomos magnéticos não ocorre somente devido ao termo de troca direta,  $J$ . Pode ocorrer também o caso em que dois íons magnéticos sejam separados por um átomo não magnético (isto é, que tem sua última camada eletrônica completa). Nesse caso, os átomos magnéticos têm uma interação magnética intermediada por elétrons do seu vizinho em comum, não magnético. Esse tipo de interação é denominada super-troca [27].

Uma outra fonte de interação magnética pode ocorrer entre elétrons nas camadas  $f$  parcialmente cheias em materiais terras raras. Em adição a seu acoplamento de troca direta, os elétrons  $f$  são acoplados com elétrons de condução pela interação entre eles. Essa interação pode ser mais forte que o acoplamento de troca direta, já que nas camadas  $f$  geralmente a sobreposição da função de onda é pequena. Esse mecanismo é denominado

como troca indireta [27]. Em geral, os termos  $J$  terão contribuições de mais de um mecanismo.

## 2.3 Modelo de Ising em um Campo Longitudinal

### 2.3.1 Método Aproximativo: Teoria do Campo Molecular

Essa seção irá se debruçar em uma compreensível descrição do mais básico método de solução para o modelo de Ising de spin- $\frac{1}{2}$  conhecida como aproximação do campo molecular ou campo médio [28], para o caso do modelo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising num campo longitudinal.

A aproximação de campo médio oferece uma ferramenta simples para estimar o comportamento magnético geral de sistemas estatísticos de spin em redes complexas, onde o tratamento exato não pode ser aplicado.

O modelo Ising pode ser representado por rede de geometria arbitrária formada por  $N$  spins, na qual cada um dos  $N$  sítios da rede está preenchido por um spin  $\sigma$ , que pode assumir dois valores,  $+\frac{1}{2}$  (spin orientado no sentido positivo do referencial) e  $-\frac{1}{2}$  (spin orientado no sentido negativo do referencial).

Agora, considere uma rede de spins de Ising submetida, em adição à interação de troca entre primeiros vizinhos  $J$ , a um campo externo  $h$ , relacionado com a energia magnetostática de Zeeman que representa a interação do momento de dipolo magnético com o campo magnético externo  $H$ , como descrito na equação 2.24.

A definição do campo externo  $h$  engloba o fator  $g$  de Landé e a o magneton de Bohr  $\mu_B$  através da relação  $h = g\mu_B H$ . Além disso, para  $J > 0$ , o sistema se comporta como ferromagnético. Para  $J < 0$ , o sistema será antiferromagnético.

O Hamiltoniano deste modelo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising num campo longitudinal é dado pela equação:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle}^{\frac{qN}{2}} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{k=1}^N \sigma_k. \quad (2.25)$$

Na equação acima,  $q$  representa o número de coordenação (número de vizinhos próximos). O modelo de Ising dado pela eq. 2.25 é semi-clássico, porque ele leva em consideração a quantização do momento magnético (spin), mas ele é desprovido de flutuações quânticas, relacionadas com a não comutabilidade entre as componentes de spin [59].

O método do campo molecular consiste na soma sobre os graus de liberdade de spin para apenas um spin central individual e substituir todos os seus vizinhos por um campo molecular médio proporcional ao valor esperado das contribuições de todos os outros spins adjacentes [59, 27].

Deste modo, o Hamiltoniano, eq. 2.25, escrito para um único spin situado no sítio  $i$ , é:

$$\mathcal{H}_i = -J\sigma_i \sum_{j=1}^q \langle \sigma_j \rangle - h\sigma_i. \quad (2.26)$$

O princípio fundamental, deste método aproximativo, é negligenciar todas as flutuações locais nas correlações entre os pares de spins, que substancialmente simplifica o tratamento ao considerar um modelo essencialmente feito por spins não interagentes na presença de um campo efetivo  $h_{ef} = h + Jq\langle \sigma_i \rangle$ .

O ponto inicial da teoria de campo médio é a equação de Gibbs-Bogoliubov [60]. O princípio variacional de Gibbs-Bogoliubov é baseado na inequação:

$$\mathcal{G} \leq \Phi \equiv \mathcal{G}_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0, \quad (2.27)$$

Acima,  $\mathcal{G}$  e  $\mathcal{H}$  representam a verdadeira energia livre de Gibbs e o Hamiltoniano completo a ser considerado no modelo estatístico, enquanto  $\mathcal{G}_0$  e  $\mathcal{H}_0$  representam a energia livre teste e o Hamiltoniano teste do modelo estatístico simplificado no qual é possível se realizar uma solução exata ( o simbolo  $\langle \dots \rangle_0$  especifica o valor médio no ensemble canônico dentro do modelo simplificado com Hamiltoniano  $\mathcal{H}_0$  ).

A expressão  $\Phi$  representa a energia de Gibbs variacional que deve passar por um processo de minimização, uma correta escolha do Hamiltoniano teste  $\mathcal{H}_0$ . Sendo assim, a precisão da aproximação variacional será intimamente ligada à escolha da rede teste para  $\mathcal{H}_0$  que tentará descrever o modelo inicial  $\mathcal{H}$  que se deseja calcular.

Como dito anteriormente, a aproximação do campo molecular presume uma independência do spin de Ising, que é assumida pela substituição do campo magnético atual para o campo efetivo que considera a contribuição média esperada das interações entre os spins vizinhos próximos com o spin central.

Portanto, o campo médio para o modelo de Ising, numa cadeia unidimensional na presença de um campo magnético externo, pode ser mapeado utilizando-se o seguinte

Hamiltoniano teste:

$$\mathcal{H}_0 = -\gamma \sum_{k=1}^N \sigma_k, \quad (2.28)$$

que irá depender de um único parâmetro variacional  $\gamma$ , que pode ser visto como um **campo efetivo**. A função de partição  $\mathcal{Z}_0$ , a energia livre de Gibbs  $\mathcal{G}_0$  e a magnetização  $m_0 = \langle \sigma_i \rangle_0$  do modelo de Ising são, respectivamente:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_0 &= \sum_{\{\sigma_k\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_0) = \prod_{k=1}^N \sum_{\sigma_k = \pm \frac{1}{2}} \exp(\gamma \beta \sigma_k) = \left[ 2 \cosh\left(\frac{\beta \gamma}{2}\right) \right]^N, \\ \mathcal{G}_0 &= -k_B T \ln \mathcal{Z}_0 = -N k_B T \left[ \ln(2) - \ln \cosh\left(\frac{\gamma \beta}{2}\right) \right], \\ m_0 &= -\frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{G}_0}{\partial \gamma} = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta \gamma}{2}\right). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Pode ser facilmente provado, com a ajuda das equações 2.29, que o valor esperado da correlação entre pares de spins pode ser desacoplada dentro da teoria de campo médio, como uma segunda potência da magnetização local:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0 = \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 = m_0^2, \quad (2.30)$$

e subsequentemente, pode-se calcular o valor médio entre o Hamiltoniano teste  $\mathcal{H}_0$  e o Hamiltoniano do modelo inicial  $\mathcal{H}$ , que representam o lado direito da inequação Gibbs-Bogoliubov:

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = \sum_{\{\sigma_k\}} [\mathcal{H} - \mathcal{H}_0] \exp(-\beta \mathcal{H}_0) = -N m_0 \left( \frac{q J m_0}{2} + h - \gamma \right). \quad (2.31)$$

A forma final da energia livre  $\Phi = \mathcal{G}_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$  determina um limite superior para a energia livre de Gibbs verdadeira, que será dada pela soma das equações 2.29 e 2.31:

$$\Phi = -N k_B T \left[ \ln 2 - \ln \cosh\left(\frac{\gamma \beta}{2}\right) + \beta m_0 \left( \frac{q J m_0}{2} + h - \gamma \right) \right]. \quad (2.32)$$

Neste ponto, deve-se minimizar a energia livre  $\Phi$  com respeito ao campo  $\gamma$ , com intuito de se encontrar a energia livre de Gibbs verdadeira do sistema. Sendo assim,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \gamma} = 0 \iff (qJm_0 + h - \gamma) \frac{\partial m_0}{\partial \gamma} = 0. \quad (2.33)$$

Este procedimento encontra o valor correto do parâmetro variacional,  $\gamma = qJm_0 + h$ , que está de acordo com a expectativa fenomenológica da equação 2.26. Com o valor correto do parâmetro variacional,  $\gamma$ , aplicado na equação 2.32, obtém-se a real energia livre de Gibbs do sistema:

$$\mathcal{G} = -Nk_B T \left\{ \ln 2 - \ln \cosh \left[ \frac{\beta}{2} (qJm_0 + h) \right] - \left( \frac{\beta qJ}{2} \right) m_0^2 \right\}. \quad (2.34)$$

Interessante notar que a magnetização deve obedecer a uma equação transcendental:  $m_0 = m$ , de acordo com as equações 2.34 e 2.29:

$$m = \frac{1}{2} \tanh \left( \frac{\beta qJm}{2} \right) \quad (2.35)$$

que indica uma magnetização espontânea não nula relacionada com o ordenamento de longo alcance da fase ferromagnética em baixas temperaturas.

É bem sabido que o modelo de Ising de spin- $\frac{1}{2}$  pode exibir na ausência de um campo magnético externo uma transição de fase de segunda ordem contínua de um ordenamento ferromagnético para uma fase paramagnética com o aumento da temperatura. A temperatura crítica dessa transição de fase pode ser obtida através de uma expansão em série de potências da equação 2.35 considerando-se apenas o primeiro termo da expansão temos:

$$m = \frac{\beta_c qJm}{4} \iff T_c = \frac{qJ}{4k_B} \quad (2.36)$$

onde  $T_c$  e  $\beta_c = \frac{1}{k_B T_c}$  são a temperatura crítica e o inverso da temperatura crítica, respectivamente. A natureza de como a magnetização espontânea desaparece nas proximidades do ponto crítico, e pode ser obtida pela expansão da equação 2.35, mantendo-se os 2 primeiros termos não nulos:

$$m(T \leq T_c, h = 0) \approx \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.37)$$

Deve ser frisado que o ponto crítico dessa transição de fase contínua pode ser, alternativamente, obtido de acordo com a teoria de Landau para as transições de fase como uma expansão em campo nulo da energia livre de Gibbs com respeito a um parâmetro de ordem. A fórmula 2.33 para a energia de Gibbs na ausência de um campo externo, torna-se

$$\mathcal{G}(h = 0) = -Nk_B T \left\{ \ln 2 - \ln \left[ \cosh \left( \frac{\beta q J m}{2} \right) \right] - \frac{\beta q J m^2}{2} \right\}. \quad (2.38)$$

Expandindo a expressão 2.37 com respeito a magnetização local nas proximidades do ponto crítico, surge

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(h = 0, m \rightarrow 0) &= N \left( g_0 + g_2 m^2 + g_4 m^4 \dots \right) \\ g_0 &= -k_B T \ln 2, \\ g_2 &= \frac{qJ}{2} \left( 1 - \frac{\beta q J}{2} \right), \\ g_4 &= \frac{qJ}{24} \left( \frac{\beta q J}{2} \right)^3. \end{aligned} \quad (2.39)$$

A transição de fase contínua é dada pelas constantes  $g_2 = 0$  e  $g_4 > 0$ , dentro da teoria de Landau para a transições de fase, que está de acordo com a condição crítica, relação 2.36.

Desta forma, a teoria de Landau mostra a existência de uma transição de fase contínua para o modelo de Ising de spin- $\frac{1}{2}$  independente da escolha do tipo de rede assumida. Porém a temperatura crítica varia de acordo com o número de coordenação  $q$  escolhido. Deste ponto de vista, a temperatura crítica não nula na cadeia de Ising unidimensional, com  $q = 2$ , é um dos grandes problemas da teoria do campo molecular. Para dimensões superiores, o resultado aproximado torna-se exato no limite que  $q \rightarrow \infty$ .

### 2.3.2 Solução Exata: Método da Matrix de Transferência

A maior vantagem das cadeias unidimensionais de Ising encontra-se no fato que elas podem ser tratadas exatamente através do método da matriz de transferência mesmo

na presença de um campo magnético externo [61]. Deve-se ressaltar, no entanto, que os modelos de Ising unidimensional não podem exibir uma criticalidade não-trivial em temperatura finita, em contraste com os seus homólogos bidimensionais.

Agora, considere o Hamiltoniano para uma cadeia unidimensional, com condição de contorno periódica, constituída de  $N$  spins de Ising representada por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2.40)$$

onde,  $\sigma_i = \pm \frac{1}{2}$  denota a variável de spin de Ising localizada no sítio  $i$  da cadeia linear. O acoplamento de troca  $J$  entre os primeiros-vizinhos possui a mesma intensidade por toda cadeia, por simplicidade, e a condição periódica de contorno impõe que  $\sigma_{N+1} \equiv \sigma_1$ . O comportamento global da magnetização no limite termodinâmico,  $N \rightarrow \infty$ , não depende das condições de contorno escolhidas. A definição  $\sigma_{N+1} \equiv \sigma_1$  é equivalente a ligar as duas pontas da cadeia e formar um círculo de spins, causando uma invariância translacional que simplifica bastante os cálculos.

A maneira mais direta de se obter a solução exata é o método da matriz de transferência, originalmente introduzido para a física estatística por H. A. Kramers e G. H. Wannier [18]. Por conveniência, podemos reescrever o Hamiltoniano, representado pela equação 2.40, numa forma mais simétrica:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \left[ J \sigma_i \sigma_{i+1} + h \left( \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2} \right) \right]. \quad (2.41)$$

Pelo uso do Hamiltoniano simetrizado, demonstrado na 2.41, tem-se uma função de partição,

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_i} \prod_{i=1}^N \exp \left[ - \beta \mathcal{H} \right], \quad (2.42)$$

onde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta do sistema, pode ser facilmente fatorada num produto de vários termos que relacionam apenas dois spins adjacentes:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_1 = \pm \frac{1}{2}} \sum_{\sigma_2 = \pm \frac{1}{2}} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm \frac{1}{2}} \prod_{i=1}^N \exp \left[ \beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta h \left( \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2} \right) \right]. \quad (2.43)$$

Então, pode-se substituir cada fator no produto, equação 2.43, pela função  $T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$  dependendo apenas dos dois spins vizinhos próximos,  $\sigma_i$  e  $\sigma_{i+1}$ :

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_1=\pm\frac{1}{2}} \sum_{\sigma_2=\pm\frac{1}{2}} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm\frac{1}{2}} T(\sigma_1, \sigma_2)T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_N, \sigma_1), \quad (2.44)$$

onde a função  $T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$  é:

$$T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp \left[ \beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta h \left( \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2} \right) \right]. \quad (2.45)$$

Vale salientar que a função 2.45 não é a única escolha possível para  $T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ , ela pode ser multiplicada, por exemplo, por um fator do tipo  $\exp[a(\sigma_i - \sigma_{i+1})]$ , sendo  $a$  uma constante arbitrária, sem perder a validade da equação 2.43. Contudo, a escolha de  $T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$  deve preservar a simetria:

$$T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = T(\sigma_{i+1}, \sigma_i), \quad (2.46)$$

que está de acordo com a simetria de translação imposta pela condição de contorno periódica.

Em seguida, é preciso calcular a função de partição, eq. 2.44, realizando o somatório sobre a variável de spin do sítio  $i$  das expressões  $T(\sigma_{i-1}, \sigma_i)$  e  $T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ , temos:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_i=\pm\frac{1}{2}} T(\sigma_i, \sigma_{i-1})T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) &= \sum_{\sigma_i=\pm\frac{1}{2}} \exp \left[ \beta J \sigma_i (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) + \frac{\beta h}{2} (2\sigma_i + \sigma_{i+1} + \sigma_{i-1}) \right] = \\ &\exp \left[ \frac{\beta h}{2} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \right] \left\{ \exp \left[ \frac{\beta J}{2} (\sigma_{i+1} + \sigma_{i-1}) + \frac{\beta h}{2} \right] + \exp \left[ -\frac{\beta J}{2} (\sigma_{i+1} + \sigma_{i-1}) - \frac{\beta h}{2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

O mesmo resultado pode ser obtido assumindo que  $T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$  é uma matriz quadrada,

$$T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \begin{bmatrix} T(+, +) & T(+, -) \\ T(-, +) & T(-, -) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \exp \left[ \frac{\beta}{4} (J + 2h) \right] & \exp \left( -\frac{\beta J}{4} \right) \\ \exp \left( -\frac{\beta J}{4} \right) & \exp \left[ \frac{\beta}{4} (J - 2h) \right] \end{bmatrix}, \quad (2.48)$$

que está relacionada com as 4 configurações possíveis entre dois spins adjacentes,  $\sigma_i$  e  $\sigma_{i+1}$ . O elemento de matriz  $T(+, -)$  é o fator de Boltzmann, que pode ser obtido através



equação 2.46, pela consideração da configuração de spin com  $\sigma_i = \frac{1}{2}$  e  $\sigma_{i+1} = -\frac{1}{2}$ . Cada linha na matriz  $T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$  leva em conta apenas uma configuração específica dos spins  $\sigma_i$  dentre todas as possíveis configurações acessíveis da variável  $\sigma$ , enquanto cada coluna determina um estado diferente para o spin  $\sigma_{i+1}$ .

Através da matriz  $T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ , equação 2.48, uma importante relação pode ser obtida, tomando-se o quadrado de  $T(\sigma_{i-1}, \sigma_{i+1})$

$$\begin{aligned} T^2(\sigma_{i-1}, \sigma_{i+1}) &= \left[ \begin{array}{cc} \exp \left[ \beta J \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} + \beta h \left( \frac{\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}}{2} \right) \right] & \exp \left[ -\beta J \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} + \beta h \left( \frac{\sigma_{i-1} - \sigma_{i+1}}{2} \right) \right] \\ \exp \left[ -\beta J \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} + \beta h \left( \frac{-\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}}{2} \right) \right] & \exp \left[ \beta J \sigma_{i-1} \sigma_{i+1} - \beta h \left( \frac{\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}}{2} \right) \right] \end{array} \right]^2 \\ &= \exp \left[ \frac{\beta h}{2} (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1}) \right] \left\{ \exp \left[ \frac{\beta J}{2} (\sigma_{i+1} + \sigma_{i-1}) + \frac{\beta h}{2} \right] \right. \\ &\quad \left. + \exp \left[ -\frac{\beta J}{2} (\sigma_{i+1} + \sigma_{i-1}) - \frac{\beta h}{2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Observa-se uma relação direta com a equação 2.47, ou seja,

$$\sum_{\{\sigma_i\}} T(\sigma_i, \sigma_{i-1}) T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = T^2(\sigma_{i+1}, \sigma_{i-1}). \quad (2.50)$$

Então, a função de partição,  $\mathcal{Z}$ , é escrita como a soma sobre todos os estados de spin  $\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ , podendo se tornar uma única soma sobre  $N$  sucessivas multiplicações da matriz  $T$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\sigma_1 = \pm \frac{1}{2}} \sum_{\sigma_2 = \pm \frac{1}{2}} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm \frac{1}{2}} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \cdots T(\sigma_N, \sigma_1) \\ &= \sum_{\sigma_1 = \pm \frac{1}{2}} \sum_{\sigma_3 = \pm \frac{1}{2}} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm \frac{1}{2}} T^2(\sigma_1, \sigma_3) T(\sigma_3, \sigma_4) \cdots T(\sigma_N, \sigma_1) \\ &= \sum_{\sigma_1 = \pm \frac{1}{2}} T^N(\sigma_1, \sigma_1) = T^N(+, +) + T^N(-, -) = \mathbf{Tr}[T^N]. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Já se pode compreender o porquê da matriz  $T$  ser conhecida como matriz de transferência, ela transfere a dependência de um spin para seus vizinhos próximos.

Portanto, solução exata, para a cadeia de spin de Ising num campo longitudinal, equivale a calcular o traço sobre a matriz  $T^N$ , se asseguramos condições de contorno periódicas.

Utilizar-se da invariância do traço com respeito as permutações cíclicas do produto de matrizes,  $\mathbf{Tr}[ABC] = \mathbf{Tr}[BCA] = \mathbf{Tr}[CAB]$  (sendo  $A, B$  e  $C$  representado matrizes quadradas), é bastante conveniente quando se deseja calcular o traço da matriz  $T^N$ . Com isso em mente, a matriz unitária,  $U$ , e sua inversa,  $U^{-1}$  (sendo  $UU^{-1} = 1$ ) podem ser usadas para converter  $T$  para uma forma diagonal:

$$UTU^{-1} = \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{bmatrix}. \quad (2.52)$$

Depois, inserindo estes produtos na relação 2.51, obtem-se:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \mathbf{Tr}[T^N] = \mathbf{Tr}[(UU^{-1})T(UU^{-1})T(UU^{-1})T \dots (UU^{-1})T] \\ &= \mathbf{Tr}[(U^{-1}TU)(U^{-1}TU)(U^{-1}TU) \dots (U^{-1}TU)] = \mathbf{Tr}[\Lambda^N]. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Isto significa que  $T^N$  e  $\Lambda^N$  possuem o mesmo traço, sem depender de uma particular escolha da base. A matriz  $\Lambda^N$  é a  $N$ -ésima potência de uma matriz diagonal:

$$\Lambda^N = \begin{bmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{bmatrix}. \quad (2.54)$$

Para calcular o traço desejado  $\mathbf{Tr}[T^N] = \mathbf{Tr}[\Lambda^N] = \sum_i \lambda_i^N$ , com  $i \in \{\pm\}$ , é necessário apenas calcular os autovalores  $\lambda_i$  de  $T$ . Os autovalores podem ser encontrados resolvendo a seguinte equação secular:

$$\mathbf{Det}[T - \lambda_i I] = \begin{bmatrix} \exp\left[\frac{\beta}{4}(J + 2h)\right] - \lambda_i & \exp\left(-\frac{\beta J}{4}\right) \\ \exp\left(-\frac{\beta J}{4}\right) & \exp\left[\frac{\beta}{4}(J - 2h)\right] - \lambda_i \end{bmatrix} = 0, \quad (2.55)$$

que satisfazem essa equação 2.55. Os autovalores são:

$$\lambda_{\pm} = \exp(\beta J) \left[ \cosh(\beta H) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta h) + \exp(-4\beta J)} \right]. \quad (2.56)$$

Este é o ponto final da solução exata do modelo, desde que toda a termodinâmica pode

ser obtida através da função de partição 2.53. Se especificarmos que  $h = 0$ , na equação 2.56, a função de partição obtida será a mesma independente da condição de contorno assumida, no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ . A expressão final para a energia livre de Helmholtz por spin é sempre inferior a unidade:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &= -k_B T \frac{1}{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \mathcal{Z} = -k_B T \frac{1}{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \left( \sum_i \lambda_i^N \right) \\ &= -k_B T \frac{1}{N} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \left\{ \lambda_+^N \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \right\} = -k_B T \ln \lambda_+. \end{aligned} \quad (2.57)$$

De acordo com a energia livre de Helmholtz, eq. 2.57, todas as quantidade termodinâmicas dependem somente do maior autovalor  $\lambda_+$  da matriz de transferência. Este resultado também é válido para outros sistemas interagentes de muitas partículas, que forem tratados usando o método da matriz de transferência. Então, o problema de encontrar a solução exata via o método da matriz de transferência é essencialmente um problema de encontrar o maior autovalor da matriz de transferência.

A ausência de transições de fase no modelo unidimensional de Ising significa que o modelo não pode sustentar um processo de magnetização espontânea a temperatura finita.

Para elucidar essa afirmação, deve se calcular exatamente a magnetização como função da temperatura e do campo externo, derivando a energia livre de Helmholtz eq. 2.57 com respeito ao campo externo  $h$ :

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{N} \left\langle \sum_i^N \sigma_i \right\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}^N} \sum_{\{\sigma\}} \left[ \left( \sum_i^N \sigma_i \right) \exp(-\beta \mathcal{H}) \right] \\ &= -\frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial (\beta h)} = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + \exp(-4\beta J)}}, \end{aligned} \quad (2.58)$$

onde graças a invariância de translação, os valores esperados de cada spin na rede têm que ser iguais,  $m = \langle \sigma_1 \rangle = \langle \sigma_2 \rangle = \dots = \langle \sigma_N \rangle$ .

A magnetização  $m$  é igual a zero se o campo externo é nulo, não havendo magnetização espontânea a temperatura finita. Sendo assim, o modelo de Ising unidimensional não exibe uma transição de fase para uma fase ordenada de longo alcance com  $m \neq 0$  para uma

temperatura finita.

A transição só é possível quando a temperatura é nula, onde temos um ponto crítico com um ordenamento espontâneo de longo alcance. Supondo o caso das ligações ferromagnéticas ( $J > 0$ ), a magnetização espontânea toma um valor de saturação na temperatura zero,

$$\lim_{\beta h \rightarrow 0} \lim_{T \rightarrow 0^+} m(t, h) = \pm 1,$$

e a conjectura sobre o ponto crítico sobre temperatura zero é confirmada.

### 2.3.3 Solução Exata: Correlações e Criticalidade

Para elucidar o comportamento crítico do modelo de Ising unidimensional, é necessário estudar a correlação entre os pares de spins, que depende da distância,  $r = |i - j|$ , entre os spins na rede.

Com esse propósito, vamos especificar os 2 autovetores:  $V_{\pm} = (a_{\pm}, b_{\pm})$  pertencentes a equação da secular,  $TV_{\pm} = \lambda_{\pm}V_{\pm}$  da matriz de transferência  $T$ , definida pela equação 2.48. As quatro projeções,  $a_{\pm}$  e  $b_{\pm}$ , dos autovetores  $V_{\pm}$  segue a seguinte condição:

$$a_{\pm}^2 = -b_{\pm}^2 \left( \frac{1 \pm \sqrt{1 + \frac{\exp(-4\beta J)}{\sinh^2(\beta h)}}}{1 \mp \sqrt{1 + \frac{\exp(-4\beta J)}{\sinh^2(\beta h)}}} \right). \quad (2.59)$$

que junto com a condição de normalização,  $a_{\pm}^2 + b_{\pm}^2 = 1$ , determinam precisamente os vetores  $V_{\pm}$ . Depois de um pouco de álgebra, é possível obter expressões explícitas em termos de uma nova variável  $\phi = \frac{1}{2} \operatorname{arccotg} \left[ \exp(2\beta J) \sinh(\beta H) \right]$  para os coeficientes  $a_{\pm}$  e  $b_{\pm}$ :

$$\begin{aligned} a_+ &= \cos \phi; \\ b_+ &= \sin \phi; \\ a_- &= -\sin \phi; \\ b_- &= \cos \phi. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Com a ajuda dos coeficientes, eq. 2.60, a expressão explícita da matriz unitária,  $U$ , é

$$U = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix} \quad (2.61)$$

Agora, a correlação entre os pares,  $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle$ , entre os vizinhos próximos em uma posição arbitrária,  $i$  e  $j$ , respectivamente, de uma cadeia de spins com a condição de contorno periódica. A definição estatística da função de partição nos permite calcular a correlação em termos da matriz de transferência:

$$\begin{aligned} \langle\sigma_i\sigma_j\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i\sigma_j \exp(-\beta H) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\{\sigma\}} \left[ T(\sigma_1, \sigma_2)T(\sigma_2, \sigma_3) \right. \\ &\left. \dots T(\sigma_{i-1}, \sigma_i)\sigma_i T(\sigma_i, \sigma_{i+1})T(\sigma_j, \sigma_{j-1})\sigma_j T(\sigma_{j+1}, \sigma_j) \dots T(\sigma_N, \sigma_1) \right]. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Se soma sobre todas as configurações de spin é preenchida pelo produto da matriz unitária  $U$  e sua inversa, a correlação entre dois spins pode ser rearranjada numa forma mais apropriada

$$\langle\sigma_i\sigma_{i+r}\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \mathbf{Tr} \left[ ST^{j-i}ST^{N+i-j} \right] = \frac{1}{\mathcal{Z}} \mathbf{Tr} \left[ U^{-1}SUA^{j-i}U^{-1}SUA^{N+i-j} \right], \quad (2.63)$$

usando as permutações cíclicas das matrizes dentro de um traço e o fato que a variável  $S$  com elementos  $S(\sigma_i, \sigma_j) = \sigma_i\delta_{ij}$  ( $\delta_{ij}$  é o símbolo do delta de Kronecker), que deve levar em conta os possíveis estados de  $\sigma_i$  e  $\sigma_j$ . Através de um cálculo simples a partir da equação 2.61 obtem-se:

$$U^{-1}SU = \begin{bmatrix} \cos 2\phi & -\sin 2\phi \\ -\sin 2\phi & -\cos 2\phi \end{bmatrix}, \quad (2.64)$$

que, em conjunto com a expressão explícita eq. 2.52 da matriz  $\Lambda$ , leva ao seguinte resultado para a correlação entre dois spins

$$\langle\sigma_i\sigma_{i+r}\rangle = \cos^2(2\phi) + \frac{(\lambda_+^{N-r}\lambda_-^r + \lambda_+^r\lambda_-^{N-r})}{\lambda_+^N + \lambda_-^N} \sin^2(2\phi), \quad (2.65)$$

onde  $r = |i - j|$  é a distância entre os spins  $i$  e  $j$ . No limite termodinâmico, a correlação

entre pares eq. 2.65 pode ser ligeiramente simplificada para:

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \cos^2(2\phi) + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r \sin^2(2\phi). \quad (2.66)$$

O resultado 2.66 representa o resultado mais geral para correlação entre dois spins, que depende da distância  $r$  entre os dois spins, da distância entre o maior e o menor autovalor da matriz de transferência e de duas expressões, diretamente conectadas com a relação  $\cot 2\phi = \exp(2\beta J) \sinh(\beta h)$ :

$$\cos 2\phi = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + \exp(-4\beta J)}}, \quad \sin 2\phi = \frac{\sinh(-2\beta J)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + \exp(-4\beta J)}}. \quad (2.67)$$

Na ausência de um campo externo ( $H = 0$ ), obtém-se  $\cos(2\phi) = 0$  e  $\sin(2\phi) = 1$ . Então, a expressão eq. 2.66 para a correlação assume a seguinte forma:

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^r = \left[ \tanh(\beta J) \right]^r \quad (2.68)$$

Através desse resultado, percebe-se que a correlação entre os spins possui um decaimento tipo exponencial com relação a distância  $r$  entre os spins. É importante frisar que  $\tanh(\beta J) < 1$  para alguma temperatura finita qualquer. Então, no limite que  $r \rightarrow \infty$  tem-se que  $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle = 0$ .

No limite de baixíssimas temperaturas,  $T \rightarrow 0$ , com  $r \rightarrow \infty$ , tem-se que  $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle = 1$ , mostrando um ordenamento espontâneo no limite de baixíssimas temperatura.

Pode-se também definir a função de correlação entre dois spins mais geral como:

$$\Gamma_{ij}(r) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = \langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \left[ \tanh(\beta J) \right]^r, \quad (2.69)$$

que pode servir como medida da flutuação presente num determinado modelo de spin. Como a temperatura crítica do sistema é nula, ao invés de uma diferença relativa  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ , que representa uma indeterminação, irá se utilizar a variável  $t = \exp(-2\beta J)$ , que será zero quando a temperatura for nula e a 1 quando a temperatura  $T$  tender ao infinito. Sendo assim,

$$\Gamma_{ij}(r) = \left[ \frac{1-t}{1+t} \right]^r. \quad (2.70)$$

A função de correlação  $\Gamma_{ij}(r)$  está relacionada ao comprimento de correlação  $\xi$  através de

$$\xi = \frac{r}{\ln \Gamma_{ij}(r)} = -\frac{1}{\ln \left( \frac{1+t}{1-t} \right)}. \quad (2.71)$$

Quando se está no limite da temperatura crítica ( $t \rightarrow 0$ ), tem-se que  $\xi = (2t)^{-1}$ , permitindo indentificar os expoentes críticos  $\nu = 1$  e  $\eta = 1$ , relacionados respectivamente com o comprimento de correlação  $\xi$  e com a função de correlação  $\Gamma_{ij}(r)$  eq. 2.70 da cadeia de Ising.

Analisando o comportamento da magnetização eq. 2.58 próximo da temperatura crítica do sistema em termos de  $t$ , obtem-se

$$m = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + t^2}}, \quad (2.72)$$

assumindo um campo magnético pequeno,  $|\beta h| \ll 1$ , a expressão fica

$$m = \frac{\beta h}{\sqrt{(\beta h)^2 + t^2}}. \quad (2.73)$$

No limite de baixas temperaturas,  $m(t \rightarrow 0^+, \beta h \rightarrow 0) = \pm 1$ , pode-se encontrar o expoente crítico da magnetização  $\beta$  igual a zero, enquanto o expoente crítico que determina como a magnetização aumenta como resposta a um campo magnético externo nas proximidades da temperatura crítica é dado por  $\delta = \infty$ .

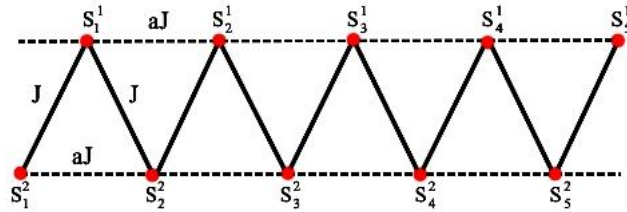
## 2.4 Modelo de Heisenberg

Nesta seção, iremos calcular explicitamente a função de partição e outras importantes quantidades do modelo de Heisenberg. Faz-se importante mencionar que a solução clássica

segue o tratamento original proposto por E. Fisher [62].

Primeiramente, deve-se escrever o Hamiltoniano do modelo unidimensional de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$  com interação entre primeiro vizinhos e de segundo vizinhos, conhecido como modelo de Majumdar-Ghosh [63], figura 2.1.

Figura 2.1: Geometria da rede degrau de spin- $\frac{1}{2}$ , conhecida como modelo Majumdar-Ghosh para o caso  $a = \frac{1}{2}$ , com  $J$  representando as interações entre os pares de spins primeiros vizinhos e  $aJ$  representando as interações entre os pares de spins segundos vizinhos.



Fonte: Autor, 2017.

$$\mathcal{H} = J \sum_{j=1}^N \left( \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} + a \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+2} \right) \quad (2.74)$$

as condições de contorno periódicas  $\vec{S}_{N+1} \equiv \vec{S}_1$  e  $\vec{S}_{N+2} \equiv \vec{S}_2$  são impostas por simplicidade. Note que o Hamiltoniano 2.74 se reduz ao modelo de Majumdar-Ghosh pela restrição  $a = \frac{1}{2}$ . A adição de uma interação de segundo vizinhos facilita a obtenção da solução exata comparada com o modelo com interação apenas de primeiros vizinhos, que pode ser exatamente tratado usando a solução do método do ansatz de Bethe [4].

Agora, considere um Hamiltoniano teste dado por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_t &= \frac{J}{4} \sum_{j=1}^N \left( \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} + \frac{1}{2} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+2} \right)^2 = \\ & J \sum_{j=1}^N \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} + \frac{J}{2} \sum_{j=1}^N \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+2} + \frac{3J}{4} \sum_{j=1}^N S_j^2 \end{aligned} \quad (2.75)$$



Pode-se relacionar o Hamiltoniano teste, eq. 2.75, com o Hamiltoniano do modelo de Majumdar-Ghosh, eq. 2.74, por intermedio de:

$$\mathcal{H}_{MG} = \mathcal{H}_t - \frac{9}{16}NJ \quad (2.76)$$

A eq. 2.76 mostra que os autovalores obtidos pelo Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{MG}$  diferem dos autovalores obtidos pelo Hamiltoniano teste  $\mathcal{H}_t$  por uma constante  $-\frac{9NJ}{16}$ . Para conseguir um entendimento de como são as configurações possíveis para os spins no estado fundamental, será proposto um Hamiltoniano apenas formado por dois spins (dímero) que formam o degrau:

$$\mathcal{H}_d = J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2. \quad (2.77)$$

As componentes do operador de spin,  $\vec{S}_i \equiv (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ , são representadas pelas matrizes de Pauli:

$$S_i^x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}_j, \quad S_i^y = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}_j, \quad S_i^z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}_j, \quad (2.78)$$

O Hamiltoniano eq. 2.77, que representa o dímero de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ , pode ser descrito através da representação matricial:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_d &= \begin{bmatrix} \langle \uparrow\uparrow | \mathcal{H}_d | \uparrow\uparrow \rangle & \langle \uparrow\uparrow | \mathcal{H}_d | \uparrow\downarrow \rangle & \langle \uparrow\uparrow | \mathcal{H}_d | \downarrow\uparrow \rangle & \langle \uparrow\uparrow | \mathcal{H}_d | \downarrow\downarrow \rangle \\ \langle \uparrow\downarrow | \mathcal{H}_d | \uparrow\uparrow \rangle & \langle \uparrow\downarrow | \mathcal{H}_d | \uparrow\downarrow \rangle & \langle \uparrow\downarrow | \mathcal{H}_d | \downarrow\uparrow \rangle & \langle \uparrow\downarrow | \mathcal{H}_d | \downarrow\downarrow \rangle \\ \langle \downarrow\uparrow | \mathcal{H}_d | \uparrow\uparrow \rangle & \langle \downarrow\uparrow | \mathcal{H}_d | \uparrow\downarrow \rangle & \langle \downarrow\uparrow | \mathcal{H}_d | \downarrow\uparrow \rangle & \langle \downarrow\uparrow | \mathcal{H}_d | \downarrow\downarrow \rangle \\ \langle \downarrow\downarrow | \mathcal{H}_d | \uparrow\uparrow \rangle & \langle \downarrow\downarrow | \mathcal{H}_d | \uparrow\downarrow \rangle & \langle \downarrow\downarrow | \mathcal{H}_d | \downarrow\uparrow \rangle & \langle \downarrow\downarrow | \mathcal{H}_d | \downarrow\downarrow \rangle \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{J}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{J}{4} & \frac{J}{2} & 0 \\ 0 & \frac{J}{2} & -\frac{J}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J}{4} \end{bmatrix}, \quad (2.79) \end{aligned}$$

sendo estes os quatro estados de spin ortogonais usados como base do sistema:

$$\begin{aligned}
 |\uparrow\uparrow\rangle &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2, & |\uparrow\downarrow\rangle &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2, \\
 |\downarrow\uparrow\rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2, & |\downarrow\downarrow\rangle &= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2.
 \end{aligned} \tag{2.80}$$

A diagonalização, do Hamiltoniano 2.79, dará o completo espectro de autovalores e consequentemente suas autofunções. Então, os autovalores e autovetores correspondentes serão:

$$E_0 = \frac{-3J}{4} \quad |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \tag{2.81}$$

$$E_1 = \frac{J}{4} \quad |\psi_1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \tag{2.82}$$

$$E_2 = \frac{J}{4} \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \tag{2.83}$$

$$E_3 = \frac{J}{4} \quad |\psi_3\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \tag{2.84}$$

O espectro de autovalores é bastante interessante, por ser constituído por um único nível não degenerado ( o singleto:  $|\psi_0\rangle$  ) que está separado por uma diferença de energia  $J$  de outro estado triplamente degenerado ( o tripleto:  $|\psi_1\rangle$ ,  $|\psi_2\rangle$  e  $|\psi_3\rangle$  ). Os estados ferromagnéticos,  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_3\rangle$ , possuem a mesma energia  $\frac{J}{4}$ . Em contraste a esse fato, os estados antiferromagnéticos,  $|\psi_2\rangle$  e  $|\psi_0\rangle$ , não estão no mesmo nível energético.

Pela consideração de interações antiferromagnéticas,  $J > 0$ , o estado fundamental do modelo de Heisenberg com spin- $\frac{1}{2}$  na rede de Majumdar-Ghosh é caracterizado pelo produto de  $\frac{N}{2}$  funções do estado singleto [4]. Sendo assim, a energia do estado fundamental é obtido pelo produto destes  $\frac{N}{2}$  pares de spins com energia  $E_0$ , ou seja  $E = \frac{E_0 N}{2} = \frac{-3NJ}{8}$ .

Este modelo apresenta um perfeito ordenamento, que é conhecido como cristal de dímeros. Devido a completo ordenamento dos spins que formam os dímeros. O que contrasta bastante com os demais spins pertencentes a diferentes dímeros que possuem correlação nula.

## 2.5 Efeito magnetocalórico

O efeito magnetocalórico possibilita materiais magnéticos serem aquecidos (resfriados), devido a variação de um campo magnético externo, sendo uma das aplicações mais interessantes das propriedades magnéticas. De fato, não é apenas uma variação na temperatura do composto químico, mas também uma variação na entropia magnética do sistema sob o efeito do campo magnético. Este efeito é conhecido desde 1881 quando o físico alemão Emil Warburg [64] percebeu que um metal aumentava sua temperatura ao ser aproximado de um forte ímã.

Posteriormente, esse mesmo efeito foi utilizado para obter também baixas temperaturas em compostos químicos, possibilitando a criação da refrigeração magnética por Debye [65] e Giaouque [66, 67]. Este processo ficou conhecido como desmagnetização adiabática, que permitiria a obtenção de temperaturas absolutas abaixo de  $1K$  por meio do efeito magnetocalórico.

O grau final de resfriamento obtido, por exemplo, por um sal paramagnético, depende não somente da temperatura inicial e do campo magnético externo, mas sobretudo das propriedades magnéticas do refrigerante. O efeito irá ocorrer em todos os materiais magnéticos, porém é mais comum em materiais que apresentem transição magnética [68].

Apesar das verificações experimentais, o entendimento teórico só surgiu a partir de 1928, quando Weiss e Piccard [69] explicaram o efeito. A partir destes trabalhos, os estudos da entropia magnética, que é relacionada diretamente ao efeito magnetocalórico, foram direcionados a obtenção de refrigeração magnética [67]. Para entender o mecanismo que torna possível esse efeito, se faz necessário descrever alguns efeitos magnéticos e algo sobre a estrutura da matéria, mostrando que os spins são de extremo interesse para o estudo de fenômenos físicos em baixas temperaturas.

Quando se aplica um campo magnético sobre um composto químico, em uma temperatura cujos spins estão desordenados, isso favorece o ordenamento dos momentos magnéticos no sentido deste campo externo, causando uma diminuição na entropia magnética. O quanto a substância se magnetiza, sob a ação de um determinado campo, é quantificado pela susceptibilidade. Esse ordenamento magnético irá competir com a desordem devido à agitação térmica, ou seja, o maior ordenamento ocorrerá em baixas temperaturas, em situações de baixa entropia magnética.

O efeito magnetocalórico gigante foi descoberto primeiramente nos compostos  $Gd_5Si_2Ge_2$

[70],  $Tb_5Si_2Ge_2$  [71]. O processo de refrigeração magnética consiste num ciclo dado por duas etapas: uma isotérmica e outra adiabática; e as grandezas medidas são a variação da entropia magnética e a variação da temperatura adiabática, dadas respectivamente por:

$$\Delta S_{iso} = [S(T)_{H=0} - S(T)_{H \neq 0}] \quad (2.85)$$

e

$$\Delta T_{ad} = [T(S)_{H=0} - T(S)_{H \neq 0}] \quad (2.86)$$

A entropia de um sistema magnético é a soma das das entropias de rede, eletrônica e magnética [72], sendo apenas a entropia magnética dependente do campo, pois este ordena os spins da rede diminuindo a entropia. Deste modo, como o efeito magnetocalórico é resultado da variação do campo, apenas a entropia eletrônica está excluída deste efeito. Esta entropia é inversamente proporcional à força do campo e diretamente proporcional à temperatura. Tentar retornar à mesma temperatura inicial é um dos problemas da aplicação comercial do efeito magnetocalórico, pois caso isto não ocorra, é necessário um trabalho extra para voltar a esta temperatura.

Como a entropia é uma função de estado, sua variação infinitesimal pode ser descrita da seguinte forma:

$$dS = \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_H dT + \left( \frac{\partial S}{\partial H} \right)_T dH \quad (2.87)$$

Considerando um processo isotérmico, temos que  $\frac{\partial S}{\partial T} = 0$ . Sendo assim, a variação infinitesimal da entropia é dada por:

$$dS = \left( \frac{\partial S}{\partial H} \right)_T dH = \left( \frac{\partial M}{\partial T} \right)_H dH. \quad (2.88)$$

Vale ressaltar que a obtenção dos potenciais magnetocalóricos através das relações de Maxwell, como a equação 2.88, só é válida para compostos com transições de fase de segunda ordem, pois para materiais com transição de primeira ordem, a derivada da magnetização não é definida na transição de fase. Contudo, experimentalmente, a transição

ocorre em uma faixa de temperatura tornando a derivada da magnetização definida. Assim, um intenso EMC é esperado na região de uma transição de fase magnética, e o efeito pode ser maximizado quando o parâmetro de ordem da transição magnética muda intensamente dentro de um estreito intervalo de temperatura. O que é verdade para transições de fase de primeira ordem.

A maior parte das das transições de fase magnética é de segunda ordem. Por outro lado, o interesse em transições de primeira ordem está diretamente relacionado com o fato de que aplicando um campo magnético relativamente pequeno podemos induzir uma intensa mudança na entropia, devido ao fato de possuir certa quantidade de calor latente. No entanto, em qualquer transição de primeira ordem também ocorre histerese (térmica ou magnética), a qual deve ser suficientemente pequena para aplicações. Entretanto, vale lembrar que as relações de Maxwell são obtidas utilizando a termodinâmica do equilíbrio que não são válidas na região da transição de fase de primeira ordem que apresenta metaestabilidade e coexistência de fases. A utilização das relações de Maxwell para determinar os potenciais magnetocalóricos em materiais com transição de primeira ordem é um assunto muito controverso na literatura.

Integrando a expressão 2.88, a variação de entropia é dada por:

$$\Delta S_{iso} = \int_{H_1}^{H_2} \left( \frac{\partial M}{\partial T} \right)_H dH \quad (2.89)$$

Esta é a relação de Maxwell para a variação isotérmica da entropia e, por meio dela, vemos que a variação da entropia depende da derivada da magnetização em relação à temperatura com campo aplicado constante. Quando essa derivada é negativa, temos o efeito magnetocalórico direto, que ocorre nos materiais ferromagnéticos. Neste caso, a magnetização decresce com o aumento da temperatura até que se chegue na temperatura de Curie, onde há a transição para a fase paramagnética. Quando esta derivada é positiva, temos o efeito magnetocalórico inverso e há um aumento da magnetização com o aumento da temperatura. Materiais antiferromagnéticos apresentam este efeito na presença de um campo magnético externo para temperaturas abaixo da temperatura de Néel. Num processo adiabático,  $dS = 0$  na equação 2.87, tem-se:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_S = -\frac{\left(\frac{\partial S}{\partial H}\right)_T}{\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_H} \quad (2.90)$$

Para este processo, temos que o calor específico a campo constante pode ser escrito como:

$$C_H dT = -T \left(\frac{\partial S}{\partial H}\right)_T dH \quad (2.91)$$

e então podemos escrever:

$$\Delta T_{ad} = \int_{H_1}^{H_2} \frac{T}{C_H} \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_h dH \quad (2.92)$$

Esta é a relação de Maxwell para a variação adiabática da temperatura. Essa equação pode ser relacionada na análise de sistemas magnéticos com o parâmetro de Gruneisen em condições adiabáticas [73]:

$$\Theta_h = -\frac{1}{C_H} \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_h, \quad (2.93)$$

onde  $\Theta_h$  é o parâmetro de Gruneisen, que mede o efeito magnetocalórico em materiais.

Da mesma maneira que a equação 2.89, tem-se que  $\Delta T_{ad}$  irá também depender da derivada da magnetização em relação à temperatura, porém com o sinal negativo. O aumento no campo externo produz uma redução da temperatura e, inversamente, um decréscimo no campo induz um aumento na temperatura.

O ciclo do EMC torna-se mais eficiente, quando há uma variação máxima da entropia no processo isotérmico e uma variação máxima da temperatura no processo adiabático. Em compostos ferromagnéticos, isto torna-se possível quando tomamos o limite de temperatura próximo a da temperatura de Curie. Neste limite, surge um equilíbrio entre o ordenamento dos momentos magnéticos devido à influência do campo externo e o desordenamento deles devido à agitação térmica.

Para um paramagneto ideal, temos uma taxa magnetocalórica:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial H}\right)_S = \frac{T}{H} \quad (2.94)$$

A razão entre a taxa magnetocalórica do material e a taxa magnetocalórica do paramagneto é chamada de taxa magnetocalórica normalizada. Já a capacidade de refrigeração  $q$  é uma característica intrínseca da substância que pode ser usada como refrigerante em um refrigerador. Esta é caracterizada diretamente pela mudança de entropia magnética do sólido como segue:

$$q = - \int_{T_1}^{T_2} \Delta S_{iso} dT \quad (2.95)$$

a qual indica quanto calor pode ser transferido de uma fonte fria  $T_1$  para uma fonte quente  $T_2$  do refrigerador em um ciclo termodinâmico ideal. Logo, a capacidade de refrigeração de determinado material nada mais é que a área sob a curva da variação de entropia magnética em função da temperatura. Portanto,  $\Delta S_{iso}$  é geralmente mais usado para representar o efeito magnetocalórico de alguma amostra, pois pode ser aplicada diretamente em  $q$  para ser conhecido a capacidade de refrigeração da amostra.

A descoberta do efeito magnetocalórico gigante a temperatura ambiente no composto  $Gd_5Si_2Ge_2$  em 1997 [74] destacou ainda mais a aplicação do efeito magnetocalórico em refrigeradores. Desde então, o Gadolínio tem se mostrado um material promissor, pois sua temperatura de ordenamento magnético é de 294K. Foram obtidos valores de  $\frac{\Delta T}{\Delta H} \approx \frac{3K}{T}$  para valores de campo fraco na temperatura crítica.

É importante frisar que os processos de resfriamento comuns, resfriamento de um gás em uma máquina de expansão, são nocivos ao ambiente, já que utilizam os gases CFC (clorofluorcarboneto) e HCFC (hidrofluorcarbonetos). Além disso, consomem muita energia, tornando a refrigeração magnética uma saída ecológica para uma economia sustentável melhorada. Entretanto, para o uso de um material num refrigerador magnético comercial, é necessário levar em consideração outros fatores além de sua eficiência (razão  $\frac{\Delta T}{\Delta H}$ ). Estes fatores são os custos do material, custos de preparação e fabricação, histerese, corrosão, estabilidade, dependência temporal da variação da temperatura adiabática e ainda fatores relacionados à saúde, como se o material é carcinogênico ou venenoso.

## 2.6 Sistemas de spin frustrados

Modelos quânticos de spins geometricamente frustrados representam um tópico fascinante das atuais pesquisas em física da matéria condensada [27] e de informação quântica [75]. Contudo, há quase um século atrás, os modelos magnéticos de spin serviram mais como curiosos modelos matemáticos idealizados, sem nenhuma correspondência direta a algum material magnético real específico [76]. O interesse nesses modelos era devido às propriedades magnéticas únicas, intimamente ligadas aos exóticos estados fundamentais quânticos [5].

O termo "frustração" foi primeiramente proposto [77] para descrever a situação onde um spin (ou diversos spins) no sistema não conseguem encontrar uma orientação para satisfazer simultaneamente todas as interações com seus vizinhos. Esta definição se aplica a todos os modelos de spins em redes, como os modelo de Ising, Heisenberg, Potts [78] e ao modelo m-vetorial [79], por exemplo. Em baixas temperaturas, devido a efeitos quânticos e frustração, sistemas de baixa dimensionalidade apresentam propriedades "exóticas", como por exemplo, estruturas de platôs de magnetização e fases reentrantes. Em geral, a frustração é causada seja pelas interações competitivas ( como no modelo de Villain [80] ) ou pela estrutura da rede dos spins [4] com interação antiferromagnética entre os primeiros vizinhos. Ou seja, a frustração geométrica só pode ocorrer quando ao menos algumas das interações de troca da rede são antiferromagnéticas.

As interações competitivas entre os momentos magnéticos da rede podem produzir um efeito chamado de reentrância. Esta é uma fase sem ordenamento de longo alcance ou sem nenhum ordenamento numa região de temperatura abaixo da fase ordenada [4]. Isto é visto no diagrama de fases como uma mudança da fase desordenada para uma fase ordenada e posteriormente a transição oposta, da fase ordenada para a desordenada, a medida que a temperatura for diminuindo.

O comportamento do diagrama de fase, como visto, é muito rico em modelos frustrados. A degenerescência no estado fundamental é enorme, podendo ser infinita em algumas situações. Essas degenerescências tendem a ser reduzidas com o aumento das flutuações térmicas.

Os platôs de magnetização são as situações onde a magnetização se mantém constante mesmo com a variação do campo magnético aplicado, caracterizada por uma reta horizontal na curva de magnetização em função do campo externo aplicado. Esses platôs



são observados em vários tipos de redes frustradas [4] e em compostos sintetizados nos laboratórios.

## 2.7 Platôs de Magnetização

Devido às flutuações quânticas e às frustrações geométricas impostas, sistemas de baixa dimensionalidade, como o tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$ , apresentam propriedades "exóticas", nas regiões de campos externos baixos e com pouca agitação térmica, como, por exemplo, estrutura de platôs de magnetização. A origem real deste platôs de magnetização ainda é um ponto de intensificado debate entre os pesquisadores da área de sistemas magnéticos, havendo vários modelos quânticos e clássicos para reproduzir essa estrutura de platôs.

O fenômeno da frustração é caracterizado por existir patamares de estados intermediários da magnetização em que a magnetização  $m$  é uma fração da magnetização total de saturação local  $m_{sat}$ . O fenômeno é análogo ao efeito de Hall quântico no qual a resistividade elétrica exibe platôs como funções do campo externo magnético. Osgikawa e colaboradores [23] encontraram uma condição para a ocorrência destes platôs de magnetização em modelos quase unidimensionais pela generalização do modelo de LSM [24] incluindo o campo externo magnético. Para um sistema de spins qualquer, a condição de quantização pode ser escrita como:

$$(S_u - m_u)p \in Z \quad (2.96)$$

onde  $p$  é o período do estado fundamental,  $S_u$  e  $m_u$  são o spin total e a magnetização total da célula unitária. De acordo com essa regra, o número de platôs disponíveis pode ser aumentado tanto pelo aumento do spin total na célula unitária  $S_u$  quanto pela quebra da simetria de translação, pelo aumento de  $p$ . A condição de quantização é necessária mas não suficiente, pois nem todos os platôs previstos são obtidos em geral.

Esses platôs são vistos em diversos modelos geométricos frustrados teóricos e em compostos sintetizados em laboratórios. Pode-se citar, como exemplo de sistema que apresenta platô fracionário de um terço da magnetização de saturação, a reação de troca iônica no caso da rede perovskite [81, 82], com tripla camada de  $(CuBr)Sr_2Nb_3O_{10}$ , um cálcio de titânio óxido mineral composto por componentes de titanato de cálcio.

Através de experimentos de resfriamento com nitrogênio líquido de uma classe particular de óxidos metálicos cerâmicos com estrutura de perovskite, foi possível descobrir que estes compostos apresentavam temperatura crítica de supercondutividade próxima a 90 K. Georg Bednorz e Alex Muller [83] ganharam o prêmio Nobel de Física em 1987 por esta descoberta.

Cristais de perovskite apresentam simetria cúbica, com o maior átomo X localizado no centro da célula unitária, e os átomos Y ocupando os 8 vértices de estrutura da célula e os oxigênios as doze arestas. Os óxidos desses cristais apresentam as mais variadas aplicações nas áreas de magnetoresistência, mas infinitas propriedades dielétricas que são de grande importância na microeletrônica e telecomunicações, além das propriedades magnéticas [84, 85].

Resultados experimentais para os platôs de magnetização são obtidos através de métodos que incluem a difração de raios-X ou ressonância magnética nuclear onde a difração da radiação eletromagnética fornece informações sobre a natureza e parâmetros da estrutura geométrica cristalina e de orientação dos spins de uma determinada amostra. Geralmente o equipamento proposto para esse tipo de atividade é o magnetômetro, instrumento analítico configurado especialmente para o estudo de propriedades magnéticas de pequenas amostras sobre um amplo intervalo de campos magnéticos externos e temperatura.

# EMARANHAMENTO QUÂNTICO

## 3.1 Decomposição de estados

Para demonstrar a técnica de decomposição de estados, suponha um sistema quântico constituído por uma rede de spins com  $L$  spins e com  $d$  estados locais  $\{\sigma_i\}$  em cada um dos sítios  $i \in \{1, 2, \dots, L\}$ . Um exemplo disso seria o modelo de Ising, onde  $d = 2$ , representado pelas bases locais:  $\{\sigma_i\} = \{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ . A rede de spin em questão pode ter dimensão arbitrária, desde que os spins sejam ordenados em sítios.

Podemos definir estados puros no espaço  $L^d$  dimensional de Hilbert como:

$$\mathcal{H} = \otimes_{i=1}^L \mathcal{H}_i, \quad (3.1)$$

sendo  $\mathcal{H}_i = \{|1_i\rangle, \dots, |d_i\rangle\}$ .

O autoestado mais geral associado é descrito pela representação:

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c^{\sigma_1, \dots, \sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle. \quad (3.2)$$

Este tipo de representação gera uma série de problemas práticos [26, 30]. Um dos problemas ocorre na obtenção das soluções analíticas para os coeficientes  $c^{\{\sigma\}}$ . O número de coeficientes tende a crescer exponencialmente com o número de sítios  $L$  do sistema. Ao longo do desenvolvimento da mecânica quântica aplicada a sistemas magnéticos, foram sugeridas diversas técnicas aproximativas para a obtenção dos  $c^{\{\sigma\}}$  para contornar esse problema.

A primeira aproximação padrão de decomposição de estados, com o intuito de reduzir

esse crescimento exponencial dos coeficientes, ficou conhecida como aproximação de campo médio, já discutida na seção 2.3.1. A aproximação de campo médio, para representar a decomposição de estados, consiste em fatorizar os coeficientes da seguinte maneira:

$$c^{\sigma_1, \dots, \sigma_L} = c^{\sigma_1} c^{\sigma_2} \dots c^{\sigma_L}. \quad (3.3)$$

Aplicando a aproximação de campo médio, saímos de um espaço formado por  $d^L$  coeficientes e entramos num espaço formado por  $d \times L$  coeficientes. Existem situações nas quais pode-se assumir a invariância translacional dos estados. A dimensão que representa o espaço irá se reduzir ainda mais drasticamente para apenas  $d$ .

Tal decomposição foi proposta dentro da teoria do campo molecular criada por Weiss (1907) [28]: as orientações dos spins são obtidas assumindo que eles são expostos a dois campos: um campo magnético externo e um campo magnético efetivo. O campo magnético efetivo representa a interação média de um spin com todos os outros sítios interagentes da rede. Contudo, essa aproximação de campo efetivo cancela todos os efeitos de correlações quânticas no modelo.

Para demonstrarmos uma representação prática cujos os coeficientes são não fatoráveis e que não pode ser obtida pela aproximação de Weiss, propomos o exemplo simples de dois spins  $\frac{1}{2}$ , onde  $\mathcal{H}_i = \{|\uparrow_i\rangle, |\downarrow_i\rangle\}$ , representados pelo produto tensorial dos hamiltonianos individuais:  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Esta representação mais sofisticada, que mistura o princípio da superposição aliado ao produto tensorial, nos leva a um autoestado não normalizado com coeficientes não fatoráveis, formada por:

$$|\psi\rangle = c^{\uparrow\uparrow} |\uparrow\uparrow\rangle + c^{\uparrow\downarrow} |\uparrow\downarrow\rangle + c^{\downarrow\uparrow} |\downarrow\uparrow\rangle + c^{\downarrow\downarrow} |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (3.4)$$

Através deste exemplo simples, fica claro que nem todos os coeficientes  $c^{\{\sigma\}}$  da eq. 3.4 podem ser fatoráveis, como propõe a teoria de campo molecular, mais explicitamente os coeficientes  $c^{\uparrow\downarrow}$  e  $c^{\downarrow\uparrow}$  não podem ser fatoráveis. Se os estados forem fatoráveis, serão chamados de estados produto. Caso não, serão chamados de estados emaranhados.

A importância dos estados emaranhados surge devido à possibilidade de quebra na propriedade de localidade nas transferências de informação e pela presença de correlações

quânticas, que são fenômenos essenciais para o processamento de informação e comunicação quântica [86].

Se a teoria de Weiss não captura as correlações quânticas presentes no sistema, como reescrever a representação descrita pela eq. 3.3 para contemplar também os estados emaranhados? Uma forma de responder a essa pergunta surge com a ideia que podemos exprimir autoestados gerais pela soma dos produtos sobre os estados locais, propondo-se uma nova descrição matricial com o propósito de substituir os coeficientes escalares,  $c^{\{\sigma\}}$  da equação 3.3, da seguinte forma:

$$c^{\sigma_1, \dots, \sigma_L} = M^{\sigma_1} M^{\sigma_2} \dots M^{\sigma_L}, \quad (3.5)$$

onde os  $M^{\sigma_i}$  são descritos por matrizes  $2 \times 2$ , exceto os que irão representar sítios que se localizam nos extremos da rede. No caso da cadeia linear, os sítios que estão nos extremos seriam:  $\sigma_1$  e  $\sigma_L$ , implicando em  $M^{\sigma_1}$  e  $M^{\sigma_L}$  terem que ser descritos por matrizes  $1 \times 2$  e  $2 \times 1$ , respectivamente. Essa representação matricial dos  $M^{\{\sigma\}}$  mantém a dimensão escalar original, dimensão de  $c^{\{\sigma\}}$ .

O autoestado total, eq. 3.2, equivalerá à seguinte expressão no espaço dos  $M^{\{\sigma\}}$ :

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} M^{\sigma_1} M^{\sigma_2} \dots M^{\sigma_L} |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L\rangle, \quad (3.6)$$

onde a cada sítio foi associado um matriz  $M^{\sigma_i}$ , onde  $\sum_{\sigma_i} (M^{\sigma_i})^\dagger M^{\sigma_i} = I$ , que depende do conjunto de estados locais  $\{\sigma_i\}$ . É interessante comentar que um dado autoestado  $\psi$  não possui uma única decomposição matricial. Estas são chamadas de decomposições de matrizes em produtos de estados (MPS). Sempre existe mais de uma maneira de se representar autoestados através de decomposições deste tipo.

Uma das mais versáteis ferramentas no estudo da separabilidade dos estados, para um sistema quântico bipartido, é chamada decomposição em valores singulares (SVD) [87, 30]. A decomposição SVD garante que, para uma matriz retangular qualquer  $C$  (com dimensão  $n_a \times n_b$ ), existe uma decomposição na forma:

$$C = USV^\dagger, \quad (3.7)$$

onde:

- $U$  possui dimensão  $(n_a \times \min(n_a, n_b))$  e tem colunas ortonormais (vetores singulares esquerdos), sendo  $U^\dagger U = I$ . Se  $n_a \leq n_b$ , isto significa que  $U$  é uma matriz unitária;
- $S$  tem dimensão  $(\min(n_a, n_b) \times \min(n_a, n_b))$ , é uma matriz diagonal de valores não-negativos  $S_{\alpha,\alpha} = s_\alpha$ , conhecidos como valores singulares. O número  $r$  de valores singulares não-nulos é o rank (de Schmidt) de  $C$ ;
- $V^\dagger$  tem dimensão  $\min(n_a, n_b) \times n_b$  e possui linhas ortonormais (vetores singulares direitos), sendo  $V^\dagger V = I$ . Se  $n_a \leq n_b$ . Isto significa que  $V^\dagger$  é uma matriz unitária.

Uma das formas de demonstrar a validade da equação 3.6 é utilizar o procedimento da decomposição em SVD dos coeficientes originais,  $c^{\sigma_1, \dots, \sigma_L}$ , resultando em:

$$\begin{aligned} c^{\sigma_1, \dots, \sigma_L} &= \sum_{a_1} U_{\sigma_1, a_1} S_{a_1, a_1} V_{a_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)}^\dagger = \sum_{a_1} \sum_{a_2} M_{a_1}^{\sigma_1} U_{(\sigma_2, a_1), a_2} S_{a_2, a_2} V_{a_2, (\sigma_3, \dots, \sigma_L)}^\dagger \\ &= \sum_{a_1} \sum_{a_2} \sum_{a_3} M_{a_1}^{\sigma_1} M_{a_1, a_2}^{\sigma_2} U_{(\sigma_3, a_2), a_3} S_{a_3, a_3} V_{a_3, (\sigma_4, \dots, \sigma_L)}^\dagger \end{aligned} \quad (3.8)$$

O processo iterativo pode continuar, substituindo os operadores  $U_{(\sigma_i, a_{i-1}), a_i}$  por uma matriz  $M^{\sigma_i}$  com entradas  $M_{a_{i-1}, a_i}^{\sigma_i} = U_{(\sigma_i, a_{i-1}), a_i}$  (e com  $M_{a_i}^{\sigma_i} = U_{\sigma_i, a_i}$ ), e assim por diante, até retomarmos a expressão eq. 3.5:

$$\begin{aligned} c^{\sigma_1, \dots, \sigma_L} &= \sum_{a_1} \sum_{a_2} \sum_{a_3} \dots \sum_{a_{L-1}} M_{a_1}^{\sigma_1} M_{a_1, a_2}^{\sigma_2} M_{a_2, a_3}^{\sigma_3} \dots M_{a_{L-1}}^{\sigma_L} = \\ &= M^{\sigma_1} M^{\sigma_2} M^{\sigma_3} \dots M^{\sigma_L}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Observa-se que esse processo leva a um produto de matrizes tal qual um MPS é definido. A manipulação do MPS deve ser cuidadosa pois esta é carregada de vários índices bastante similares, como pode ser notado até agora. Felizmente, a referência geométrica da formação dos blocos pode ser usada como um guia para a manipulação

do MPS, e por consequência na aplicação do grupo de renormalização quântico (DMRG) [88], como sera visto no próximo capítulo. Contudo a versão inicial do DMRG usa a decomposição de autovalores EVD,  $AU = U\Lambda$ , [86, 88] para uma matriz quadrática e Hermitiana  $A$ , com  $\Lambda$  representando uma matriz diagonal com autovalores reais  $\lambda_i$  e  $U$  é a matriz unitária formada por vetores colunas  $|u_i\rangle$  que formam a base ortogonal do sistema. Felizmente, SVD e EVD são intimamente conectados.

Sabendo que  $A = USV^\dagger$ , então:

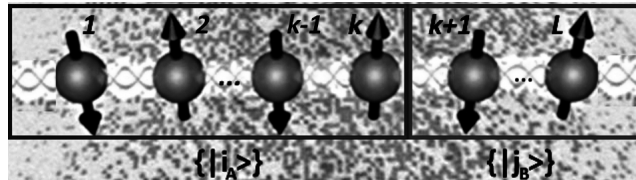
$$A^\dagger A = VSU^\dagger USV^\dagger = VS^2V^\dagger \rightarrow (A^\dagger A)V = S^2V, \quad (3.10)$$

e, similarmente, que:

$$AA^\dagger = USV^\dagger VSU^\dagger = US^2U^\dagger \rightarrow (AA^\dagger)U = S^2U. \quad (3.11)$$

Comparando a decomposição SVD com a EVD, percebe-se que os valores singulares quadráticos são os autovalores de  $A^\dagger A$  e  $AA^\dagger$ , e os respectivos autovetores são as colunas de  $U$  e  $V$  respectivamente.

Figura 3.1: Biparticionando um sistema quântico em dois blocos A e B através das bases ortonormais dos blocos.



Fonte: Autor, 2017.

Como mencionado anteriormente, a decomposição de estados quânticos conhecida como decomposição de Schmidt [89] é uma ferramenta bastante útil para a determinação de emaranhamento quântico em sistema de spins [86], sendo um instrumento importante para a extração e descrição das propriedades de emaranhamento de um estado quântico.

Assim como a verificação em termos das desigualdades de Bell [90] para caracterizar emaranhamento, a decomposição de Schmidt [89] também só é válida para estados puros. Contudo a decomposição de Schmidt pode ser aplicada a estados com um número arbitrário de qubits, desde que sejam analisados em dois conjuntos. Ou seja, tal decomposição só é válida para sistemas analisados em bipartições. Um sistema particionado desta forma é

chamado de sistema bipartido, de duas partes ou, biparticionado [30].

O termo emaranhamento foi proposto pela primeira vez em 1935 por E. Schrödinger [91] como sendo uma "ação fantasmagórica à distância", que surge ao analisar o paradoxo EPR [92] e tentar responder à pergunta: como medições em uma partícula podem influenciar a outra, estando elas separadas por uma grande distância? Essa questão introdutória gerou bastante controversias e teve sua solução dada por Bell [93]. Essa "ação fantasmagórica à distância", proporciona correlações não locais que não possuem explicação clássica, por isso dizemos que são correlações "mais fortes" que as clássicas.

Em prol de esclarecer o processo de decomposição proposto por Schmidt, considere uma bipartição de uma cadeia de  $L$  sítios em dois subsistemas  $A$  e  $B$ , com  $A$  incluindo os sítios 1 até  $k$  e  $B$  os sítios  $k + 1$  até  $L$ , como mostra figura 3.1.

Então, o estado quântico puro  $|\psi\rangle$  pode ser definido como:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\dim\mathcal{H}_A} \sum_{j=1}^{\dim\mathcal{H}_B} \psi_{ij} |i_A\rangle |j_B\rangle, \quad (3.12)$$

onde  $|i_A\rangle$  e  $|j_B\rangle$  formam as bases ortonormais dos subsistemas  $A$  e  $B$ , respectivamente. O operador densidade  $\rho$  associado ao estado quântico puro  $|\psi\rangle$  consiste em:

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (3.13)$$

A representação deste operador na base adequada é chamada de matriz densidade. Como exemplo deste operador, considere o estado com dois qubits:

$$|\psi\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle), \quad (3.14)$$

temos que o operador densidade é dado por

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2} (|00\rangle + |11\rangle) (\langle 00| + \langle 11|), \\ \rho &= \frac{1}{2} (|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|). \end{aligned} \quad (3.15)$$



Considerando a base  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$  para a representação matricial, temos que

$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}. \quad (3.16)$$

Na prática, estas bases irão ser usualmente formadas por MPS originadas das bases locais como  $\{|\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle\}$ , como mostrado no exemplo. Interpretando os coeficientes  $\psi_{ij}$  como as entradas de uma matriz retangular de dimensão  $\{\mathcal{H}_A \times \mathcal{H}_B\}$ , pode-se reescrever o estado  $|\psi\rangle$  na decomposição de Schmidt (ou em um SVD, tal que  $|\psi\rangle = USV^\dagger$ ), na forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^r s_\alpha |\alpha\rangle_A |\alpha\rangle_B \quad (3.17)$$

com  $s_\alpha$  sendo os valores singulares não nulos de  $|\psi\rangle$  para

$$|\alpha\rangle_A = \sum_{i=1}^{\dim \mathcal{H}_A} U_{i\alpha} |i\rangle_A \quad \text{e} \quad |\alpha\rangle_B = \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_B} V_{j\alpha}^* |j\rangle_B. \quad (3.18)$$

É importante notar que, devido às propriedades de  $U$  e  $V$ ,  $\{|\alpha\rangle_A\}$  e  $\{|\alpha\rangle_B\}$  formam uma base ortonormal. A física por trás dos subsistemas  $A$  e  $B$  é transcrita pelos operador de densidade reduzida,  $\hat{\rho}_i$ , da seguinte maneira:

$$\hat{\rho}_i : \left\{ \begin{array}{l} \text{tr}_B |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{\alpha=1}^r s_\alpha^2 |\alpha\rangle_A \langle\alpha|_A = \hat{\rho}_A \\ \text{tr}_A |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{\alpha=1}^r s_\alpha^2 |\alpha\rangle_B \langle\alpha|_B = \hat{\rho}_B \end{array} \right\}. \quad (3.19)$$

Através da decomposição de Schmidt,  $\hat{\rho}_i$  pode ser obtida pelo traço parcial sobre um dos subsistemas,  $A$  ou  $B$ , permitindo interessantes observações: como a igualdade dos valores não nulos das matrizes de densidades reduzidas, mesmo quando os operadores  $A$  e  $B$  forem diferentes. Esta diferença ocorrerá apenas em seus autovetores.

Esses operadores de densidade reduzida são ferramentas importantes na quantificação do emaranhamento. Pode-se quantificar emaranhamento usando, por exemplo, a entropia de emaranhamento de von Neumann [94]. O emaranhamento entre os subsistemas  $A$  e  $B$  é representado por:

$$S_{A|B}(|\psi\rangle) = -\text{tr}_A \hat{\rho}_A \ln \hat{\rho}_A = -\text{tr}_B \hat{\rho}_B \ln \hat{\rho}_B = -\sum_{\alpha=1}^r s_{\alpha}^2 \ln s_{\alpha}^2. \quad (3.20)$$

Ainda para a situação em que temos biparticionamento da cadeia, para os mesmos dois subsistemas  $A$  e  $B$ , podemos supor o autoestado mais geral do sistema como um produto tensorial direto dos estados que formam os subsistemas,  $A$  e  $B$ :

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_l} |\alpha_l\rangle_A |\alpha_l\rangle_B, \quad (3.21)$$

sendo

$$|\alpha_l\rangle_i : \left\{ \begin{array}{l} |\alpha_l\rangle_A = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} (M^{\sigma_1}, M^{\sigma_2}, \dots, M^{\sigma_l})_{1, \alpha_l} |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_l\rangle \\ |\alpha_l\rangle_B = \sum_{\sigma_{l+1}, \dots, \sigma_L} (M^{\sigma_{l+1}}, M^{\sigma_{l+2}}, \dots, M^{\sigma_L})_{\alpha_l, 1} |\sigma_{l+1}, \sigma_{l+2}, \dots, \sigma_L\rangle \end{array} \right\} \quad (3.22)$$

Neste tipo de representação o estado escolhido para representar um dos blocos será ortogonal e o outro estado, em geral, não será. No nosso caso, o sistema é dito normalizado à esquerda, pois a normalização irá ocorrer sobre a base que descreve o subsistema  $A$ :

$$\begin{aligned} \langle \alpha'_l | |\alpha_l\rangle_A &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} (M^{\sigma_1}, M^{\sigma_2}, \dots, M^{\sigma_l})_{1, \alpha'_l}^* (M^{\sigma_1}, M^{\sigma_2}, \dots, M^{\sigma_l})_{1, \alpha_l} \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} (M^{\sigma_l}, M^{\sigma_{l-1}}, \dots, M^{\sigma_1})_{\alpha'_l, 1}^{\dagger} (M^{\sigma_1}, M^{\sigma_2}, \dots, M^{\sigma_l})_{1, \alpha_l} \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} (M^{\sigma_l \dagger}, M^{\sigma_{l-1} \dagger}, \dots, M^{\sigma_1 \dagger} M^{\sigma_1}, M^{\sigma_2}, \dots, M^{\sigma_l})_{\alpha'_l, \alpha_l} \\ &= \delta_{\alpha'_l, \alpha_l}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Entretanto,

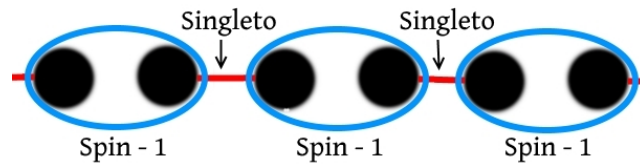
$$\begin{aligned}
\langle \alpha'_l | | \alpha_l \rangle_B &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} (M^{\sigma_{l+1}}, M^{\sigma_{l+2}}, \dots, M^{\sigma_L})_{\alpha'_l, 1}^* (M^{\sigma_{l+1}}, M^{\sigma_{l+2}}, \dots, M^{\sigma_L})_{\alpha_l, 1} \\
&= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} (M^{\sigma_L \dagger}, M^{\sigma_{L-1} \dagger}, \dots, M^{\sigma_{l+1} \dagger})_{1, \alpha'_l} (M^{\sigma_{l+1}}, M^{\sigma_{l+2}}, \dots, M^{\sigma_L})_{\alpha_l, 1} \\
&= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} (M^{\sigma_{l+1}}, M^{\sigma_{l+2}}, \dots, M^{\sigma_L} M^{\sigma_L \dagger}, M^{\sigma_{L-1} \dagger}, \dots, M^{\sigma_{l+1} \dagger})_{1, \alpha'_l}, \quad (3.24)
\end{aligned}$$

o que torna inviável a continuidade do procedimento pois, em geral,  $\sum_{\sigma} M^{\sigma} M^{\sigma \dagger} \neq I$ , mostrando que o sistema pode não ser ortonormalizado para base que representa o bloco B (pode não ser normalizado à direita).

Isso mostra que é possível obter diferentes representações exatas de  $|\psi\rangle$  na estrutura dos MPS que podem ou não ser ortonormalizáveis dentro dos blocos definidos. A escolha da representação em MPS possui influência direta na eficiência da técnica de diagonalização proposta.

A fim de termos uma noção mais prática de como a técnica MPS funciona, iremos desenvolver a técnica do MPS para obter o estado fundamental do Hamiltoniano Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT)[95, 96], modelo de spin em redes de particular interesse para o estudo de emaranhamento quântico por apresentar um estado quântico não-trivial, o estado Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT)[95], diagramatizado na figura 3.2.

Figura 3.2: O estado de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) é constituído de partículas de spin- $\frac{1}{2}$  que estão em uma alternância de estados: de estados tripletos (representados pelos círculos com spin total 1) e estados singletos (barras vermelhas).



Fonte: Autor, 2017.

O Hamiltoniano AKTL pode ser definido como:

$$H = \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} + \frac{1}{3} \left( \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} \right)^2, \quad (3.25)$$

onde, excepcionalmente no artigo original [96], o modelo é spin-1. Um das diversas formas de se representar o estado de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) é um estado

constituído de partículas de spin- $\frac{1}{2}$  que estão em uma alternância de estados: de estados tripletos (representados pelos círculos com spin total 1) e estados singletos (barras vermelhas). Cada spin-1 dos sítios da cadeia unidimensional pode ser substituído por um par de spin- $\frac{1}{2}$  que são completamente simetrizadas, os quatro estados fundamentais a serem considerados nesse modelo são:

- As bases que representam os estados tripleto, representando o estados  $S = 1$ :

$$|+\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \quad (3.26)$$

$$|1\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.27)$$

$$|-\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad (3.28)$$

- As bases que representam os estados singletos:

$$|0\rangle = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (3.29)$$

$$(3.30)$$

Desta forma, o estado geral pode ser escrito como uma decomposição MPS de estados não triviais de dimensões  $D = 2$ , para uma cadeia com  $2L$  spins- $\frac{1}{2}$  com comprimento  $L$ :

$$|\psi\rangle = \sum_a \sum_b c_{ab} |\mathbf{a}\mathbf{b}\rangle, \quad (3.31)$$

sendo  $|\mathbf{a}\rangle = |a_1, \dots, a_L\rangle$  e  $|\mathbf{b}\rangle = |b_1, \dots, b_L\rangle$  descrevendo o primeiro e segundo spin- $\frac{1}{2}$  em cada sítio. Agora nos iremos transcrever os estados na representação de ligações, que descreve, simultaneamente, os sítios,  $i$  e  $i + 1$ , como:

$$|W^{[i]}\rangle = \sum_{b_i, a_{i+1}} w_{b_i, a_{i+1}} |\mathbf{b}_i\rangle |\mathbf{a}_{i+1}\rangle, \quad (3.32)$$

onde foi introduzida a matriz  $2 \times 2$ ,  $w$ :

$$w = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

Quando o sistema puder ser descrito exclusivamente por estados sigletos, teremos:

$$|\psi_W\rangle = \sum_{b,a} w_{b_1,a_2} w_{b_2,a_3} \dots w_{b_{L-1},a_L} w_{b_L,a_1} |\mathbf{b}\rangle |\mathbf{a}\rangle, \quad (3.34)$$

considerando condições de contorno periódicas. Se forem assumidas condições de contorno não-periódicas, o termo  $w_{b_L,a_1}$  será omitido, e o primeiro e o último spins permanecerão isolados. Perceba-se que esse estado é um produto de estados fatorizados sobre a divisão de cada um dos sítios em dois constituintes: spin físico e auxiliar.

Introduzindo o mapeamento dos estados dos spins- $\frac{1}{2}$  auxiliares,  $|b_i\rangle |a_i\rangle \in \{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ , para os estados do spin físico (spin-1)  $|\sigma_i\rangle \in \{|+\rangle, |0\rangle, |-\rangle\}$ . Para acrescentar os estados de spin-1, equação 3.28, iremos introduzir os operadores:  $M_{ab}^\sigma |\sigma\rangle \langle ab|$ , com  $|ab\rangle$  e  $|\sigma\rangle$  descrevendo o spin auxiliar e o spin físico no sítio  $i$ , respectivamente.

Escrevendo o operador  $M_{ab}^\sigma$  como uma matriz  $2 \times 2$  (onde  $\sigma$  corresponde às linhas e  $a_i$  e  $b_i$  às colunas), temos:

$$M^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad M^0 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad M^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.35)$$

O mapeamento que descreve os estados de spin-1 pode ser representado como:

$$\sum_{\sigma} \sum_{ab} M_{a_1,b_1}^{\sigma_1} M_{a_2,b_2}^{\sigma_2} \dots M_{a_L,b_L}^{\sigma_L} |\sigma\rangle \langle ab|. \quad (3.36)$$

Sendo assim, o estado AKLT (que é uma combinação da alternância entre estados de spins-1 e spins- $\frac{1}{2}$ ),  $|\psi_W\rangle$ , pode ser mapeado como:

$$\begin{aligned} |\psi_W\rangle &= \sum_{\sigma} \sum_{b,a} M_{a_1,b_1}^{\sigma_1} w_{b_1,a_2} M_{a_2,b_2}^{\sigma_2} w_{b_2,a_3} M_{a_3,b_3}^{\sigma_3} \dots w_{b_{L-1},a_L} M_{a_L,b_L}^{\sigma_L} w_{b_L,a_1} |\sigma\rangle \\ |\psi_W\rangle &= \sum_{\sigma} M^{\sigma_1} w M^{\sigma_2} w M^{\sigma_3} \dots w M^{\sigma_L} w |\sigma\rangle, \end{aligned} \quad (3.37)$$

usando a notação matricial. Para simplificarmos ainda mais as expressão anterior, iremos

introduzir o operador  $\bar{A}^\sigma = M^\sigma w$ , de tal forma que:

$$\bar{A}^+ = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{A}^0 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \bar{A}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

O estado AKLT pode agora ser descrito por:

$$|\psi_W\rangle = \sum_{\sigma} \bar{A}^{\sigma_1} \bar{A}^{\sigma_2} \bar{A}^{\sigma_3} \dots \bar{A}^{\sigma_L} |\sigma\rangle. \quad (3.39)$$

Também é possível normalizar esses operadores,  $\sum_{\sigma} \bar{A}^{\sigma\dagger} \bar{A}^{\sigma} = \frac{3}{4} I$ , ou seja reescalar  $\bar{A}^{\sigma}$  os operadores por  $\frac{2}{\sqrt{3}}$ :

$$\bar{A}^+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{A}^0 = \begin{pmatrix} -\sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \bar{A}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

Nesta representação dos operadores  $A^\sigma$ , a normalização (no limite termodinâmico) de  $|\psi_W\rangle$  será  $\langle \psi_W | \psi_W \rangle = \sum_{i=1}^4 \lambda_i^L$ , sendo  $\lambda_i$  os autovalores de:

$$E = \sum_{\sigma} A^{*\sigma} \otimes A^{\sigma} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

ou seja,  $\lambda_i = \{1, -\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}, -\frac{1}{3}\}$ . Então,  $\langle \psi_W | \psi_W \rangle = 1 + 3(-\frac{1}{3})^L \rightarrow 1$ , quando  $L \rightarrow \infty$ .

Desta forma, é possível expressar o estado AKLT usando um MPS formado com operadores de dimensão  $2 \times 2$ , sendo o caso mais simples não-trivial de MPS [95]

Por que as decomposições de matrizes em produtos de estados (MPS) [87] são tão importantes nas técnicas de renormalização e quantificação de emaranhamento? Pode-se citar 2 razões:

- Qualquer estado quântico pode ser representado como um decomposição do tipo MPS, podendo ser manipulado mais facilmente se comparado a outras representações de estados [97]. Esse tipo de decomposição surge naturalmente quando se aplica

técnicas de grupo de renormalização em redes de spin quânticos. Contudo essa representação pode ou não ser numericamente eficiente, do ponto de vista da redução tempo computacional. Desta forma, a estrutura matemática de representação do estado escolhida para o MPS é importante.

- Há uma hierarquia no MPS, estados com pouco emaranhamento podem ser representados mais eficientemente (utilizando matrizes menores) que estados altamente emaranhados. Esses estados quânticos pouco emaranhados são de grande importância para sistemas quânticos em baixa temperatura [86].

Para provar a primeira afirmação, será preciso recorrer à decomposição em valores singulares [98]. Se existir uma matriz arbitrária,  $A$ , com dimensão  $m \times n$ , ela pode ser representada por uma decomposição do tipo  $A = USV^\dagger$ , conhecida como decomposição em valores singulares (SVD) [99]. A SVD possui um papel crucial no campo da informação quântica (quantum information), numa forma comumente chamada de decomposição de Schmidt [100]. Através dela, estados de dois sistemas quânticos são decompostos naturalmente, provendo condição necessária e suficiente para eles serem emaranhados.

## 3.2 Emaranhamento de estados puros

A Mecânica Quântica surgiu para preencher lacunas teóricas e experimentais às quais a Física Clássica não teve argumentos para preencher, como, por exemplo, a catástrofe do ultravioleta [101]. Sendo assim, Niels Bohr e Werner Heisenberg desenvolveram em 1927 a interpretação mais comum para a Mecânica Quântica, que ficou conhecida como interpretação de Copenhague [102]. Nesta interpretação o estado de um sistema físico é descrito por uma função de onda  $\Psi$  que contém toda a informação necessária para caracterizar um sistema físico.

Entretanto, a observação de possíveis inconsistências nos fundamentos da teoria quântica, mais especificamente na interpretação de Copenhague, fez Einstein, Podolsky, Rosen em 1935 [103, 92] iniciarem uma série de discussões, ou melhor uma série de "Gedankenexperiment", que ficaram conhecidos como paradoxos EPR, sobre as propriedades que as fortes correlações quânticas tinham sobre a localidade da transmissão de informação. Utilizando uma argumentação bastante engenhosa [101] para discutir os conceitos fundamentais da mecânica quântica e de transmissão de informação, realidade e de completiza

teórica (totalmente plausíveis) demonstraram que em certas ocasiões os estados quânticos ou apresentam a propriedade de não-localidade ou não serão descrições completas da realidade física.

Para Einstein et al., em um artigo de 1935 [92], uma teoria física completa deveria satisfazer duas condições:

- Cada elemento de realidade fazer parte da teoria;
- Quando prevemos com certeza o valor de um observável  $S$ , sem perturbar o sistema, então existe um elemento de realidade física relacionado a essa quantidade física.

Mas essa realidade física definida por Einstein entra em conflito com o princípio da incerteza de Heisenberg [101]: se medirmos  $r$  uma quantidade  $s$  torna-se indeterminada (sendo  $s$  e  $r$  autovalores de dois observáveis,  $S$  e  $R$ , que não comutam entre si) e não pode ser mais prevista. O valor de  $s$  só pode ser encontrado através de medida direta. Esta medida, porém, irá perturbar o sistema e altera o estado para  $\Psi_s$ , autofunção associada ao autovalor  $s$  ( $S|\Psi_s\rangle = s|\Psi_s\rangle$ ). Ou seja, podemos concluir que, se  $r$  é conhecido,  $s$  não apresenta realidade física.

Então, podemos chegar a duas hipóteses:

1. a função de onda não nos fornece uma descrição completa da realidade;
2. quando dois operadores,  $S$  e  $R$ , não comutam, as duas quantidades físicas relacionadas a eles realmente não apresentam realidade física simultaneamente.

Todavia, consideramos como falsa a hipótese (1) e chegamos à conclusão de que autofunções de operadores que não comutam correspondem à mesma realidade. Dessa forma, chegamos a uma contradição, pois a negação de (1) leva à negação de (2). Portanto, somos forçados a concluir que a função de onda não fornece uma descrição completa da realidade.

Essa argumentação, que contrária a interpretação de Copenhagen, ficou conhecida com Teoria de Variáveis Ocultas (TVO) [104]. Estas teorias têm como base fortes condições de localidade. No paradoxo EPR, a localidade significa que uma medida no sistema  $A$  não pode ser afetada por operações feitas no sistema distante  $B$  com o qual  $A$  interagiu no passado.



As TVO permaneceram em alta durante muitos anos, bem como a questão da completude da Mecânica Quântica. No entanto, em 1964 John S. Bell [90] demonstrou que, devido às suas fortes condições de localidade, as TVO são restritas a certas desigualdades que não são sempre obedecidas pelo formalismo da Mecânica Quântica.

A explicação baseada em verificações experimentais, em defesa da interpretação de Copenhague, é que a função de onda que descreve a superposição de estados quânticos possíveis existe em todos os pontos simultaneamente. O valor  $s$  observável do sistema  $A$  e o valor do observável  $r$  da sistema  $B$  não são quantidades independentes, mas são obtidos por uma mesma estrutura dentro das equações da física quântica, o que é conhecido como representação de estados emaranhados. No instante em que é feita a medição do subsistema  $A$ , todo o resto da função de onda colapsa em um único estado.

O fato da informação entre os estados estar fortemente correlacionada quanticamente poderia implicar que a informação seria transmitida de forma não local, o que significa que interações entre entidades separadas podem ocorrer instantaneamente, sem que haja qualquer relação material entre elas. É como se não existisse distância física entre dois eventos, nem mesmo o tempo existisse.

Em seu artigo de 1935, Schrödinger [105] descreveu o emaranhamento quântico como: "Quando dois sistemas, cujos estados conhecidos através de seus representantes (função de onda), entram em interação física temporária devido às forças conhecidas entre eles, e depois de um tempo de influência mútua os sistemas voltam a se separar, então não podem mais ser descritos na mesma forma que anteriormente, a saber, associados a cada um deles um representante próprio. Através da interação os dois representantes se tornam emaranhados".

As previsões probabilísticas feitas através da função de onda do sistema são irreduzíveis no sentido em que não são um mero reflexo da falta de conhecimento de variáveis escondidas (TVO). Nos eventos probabilísticos clássicos, como no lançamento de dados, usamos probabilidades para prever o resultado final pois não possuímos informação suficiente disponível, apesar de termos certeza que o processo é determinístico e que nossa falta de conhecimento traga a dinâmica caótica do mesmo. As probabilidades são utilizadas para completar as lacunas do nosso conhecimento. A interpretação de Copenhague defende que os resultados são indeterminísticos.

Sendo a física um agrupamento de conhecimentos sobre o universo que tem seus resul-

tados validados por processos de medida. Foge da alçada das interpretações de Copenhague especular para além daquilo que pode ser medido, para o que só pode ser confirmado no imaginário. A interpretação de Copenhague considera sem sentido perguntas como "onde estava o fóton antes de sua posição ter sido medida?". O ato de observar provoca o "colapso da função de onda", o que significa que, embora nos momentos anteriores a observação o estado do sistema permitisse um "imenso oceano" de possibilidades, apenas uma delas será escolhida aleatoriamente pelo processo de medição, e a função de onda resume-se instantaneamente para satisfazer essa escolha.

As propriedades do emaranhamento quântico são comumente associadas como propriedades de sistemas de duas ou mais partículas, mas na verdade são propriedades de qualquer sistema quântico composto, no sentido de que o sistema quântico não pode ser decomposto como um produto de estados de seus subsistemas constituintes, possuindo correlações não locais. Apesar de gerar uma certa estranheza inicial, ainda é possível descrever o emaranhamento quântico de um único ente físico, iremos assim descrever o emaranhamento entre diferentes graus de liberdade que o compõe (por exemplo, o momento de um átomo pode se emaranhar com seu spin pela interação com um campo magnético, como no experimento de Stern-Gerlach [106]).

No caso dos sistemas compostos, o espaço global acessível,  $E$ , é construído a partir do produto tensorial dos espaços de Hilbert,  $E_i$ , associados com os subsistemas. Esses sistemas compostos são aqueles no qual as suas partes não interagem entre si, mas podem ter interagido no passado.

Dentro deste contexto, o emaranhamento de sistemas compostos surge como uma qualidade de todo estado físico que não pode ser representado como um produto tensorial direto dos elementos dos espaços de Hilbert multiplicados.

Naturalmente, a situação mais rústica de sistema quântico onde ocorre emaranhamento é o caso de um sistema bipartido: um sistema  $A$  descrito por um base de estados  $\{|a\rangle\}$ , enquanto o sistema  $B$  tem sua base descrita por  $\{|b\rangle\}$ . A descrição do espaço de estados  $E$  para o sistema global é feita pelo produto tensorial dos espaços de estados das partes  $A$  e  $B$ , sendo  $\dim \{|a\rangle\} = m$  e  $\dim \{|b\rangle\} = n$ , com  $m \geq n$ .

Dentro de  $E$ , um vetor  $|\Psi\rangle$  é dito fatorável se  $|\psi\rangle = |\phi_A\rangle \otimes |\phi_B\rangle$ . Se tal decomposição não for possível,  $|\psi\rangle$  é dito emaranhado. Qualquer que seja a operação realizada em apenas uma das partes será referida como uma operação local, e o emaranhamento não

pode ser criado e nem destruído por operações unitárias locais. Operações unitárias locais não alteram o emaranhamento, pois apenas transformam uma base qualquer de Schmidt em outra base ortonormal [26].

Uma ferramenta comum para a identificação de combinações de estados puros é a decomposição em bases de Schmidt [26]. Na decomposição de Schmidt, um estado qualquer do sistema  $|\Psi\rangle$ , pode ser escrito como:

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^m \lambda_k |a_k\rangle \otimes |b_k\rangle, \quad (3.42)$$

onde  $m$  é a dimensão da menor parte,  $\lambda_k > 0$  e  $\sum \lambda_k^2 = 1$ . Os coeficientes  $\lambda_k$  são chamados de coeficientes de Schmidt e as bases  $\{|a_k\rangle\}$  e  $\{|b_k\rangle\}$  são as bases de Schmidt para o vetor  $|\Psi\rangle$ . As propriedades de emaranhamento bipartido de estados puros estão inteiramente contidas no conjunto dos seus coeficientes  $\lambda_k$ , espectro de Schmidt.

Sob um olhar desatento este resultado pode parecer estranho: se o espaço  $E$  tem dimensão  $n \times m$ , como o vetor  $|\Psi\rangle$  possuiria apenas  $m$  coeficientes? Vale lembrar que a decomposição de Schmidt está relacionada diretamente com decomposição em valores singulares ( $|\Psi\rangle = USV^\dagger$ ) [87, 30] e o número de elementos não nulos que representam a matriz diagonal  $S$  irá definir o número  $m$  de coeficientes não nulos para a decomposição de Schmidt. O número de coeficientes de Schmidt necessários para descrever um estado puro é chamado de número de Schmidt,  $n_s$ , sendo uma forma de quantificar o emaranhamento presente no estado puro  $|\Psi\rangle$ . Se  $n_s = 1$  o sistema puro será fatorável [89]. Como mencionado, o número  $n_s$  de um vetor de  $E$  é limitado superiormente por  $m$ .

Diferenciando-se apenas nas escolhas de fases para as bases, a decomposição de Schmidt 3.42 é única. Entretanto, toda regra possui uma exceção; e a exceção desta regra são os pares de Bell, que aparecem, como o estado de EPRB [92], quando há igualdade entre dois ou mais coeficientes de Schmidt. Na notação de qubits, análogo quântico de

um registrador binário, os pares de Bell [92] são dados por:

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle), \quad (3.43)$$

$$|\phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle), \quad (3.44)$$

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle), \quad (3.45)$$

$$|\phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle). \quad (3.46)$$

**Teorema:** Todos os pares de Bell são emaranhados.

Para demonstrar, será utilizado apenas o estado  $|\phi_+\rangle$ , já que para qualquer um dos outros 3 estados escolhidos a demonstração será totalmente análoga. Suponha que  $|\phi_+\rangle$  possa ser escrito como:

$$(c_1|0\rangle + c_2|1\rangle) \otimes (c_3|0\rangle + c_4|1\rangle), \quad (3.47)$$

com os  $c_i \in \mathcal{C}$ . Então temos a igualdade:

$$|\phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) = c_1c_3|00\rangle + c_1c_4|01\rangle + c_2c_3|10\rangle + c_2c_4|11\rangle. \quad (3.48)$$

A ortogonalidade dos vetores  $|00\rangle$ ,  $|01\rangle$ ,  $|10\rangle$  e  $|11\rangle$  nos impõe as condições:  $c_1c_3 = c_2c_4 = 0$  e  $c_1c_4 = c_2c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}$  que não podem ser satisfeitas simultaneamente, mostrando que estados de Bell não podem ser separados em um produto tensorial de vetores dos subespaços de Hilbert. Esta forte correlação entre os subsistemas é própria do emaranhamento. [107].

Na teoria clássica da informação um Bit é a menor unidade de informação que pode ser armazenada e transmitida de uma fonte para um receptor, assumindo somente dois valores possíveis: zero ou um, mais ou menos, sim ou não, para cima ou para baixo, com corrente ou sem corrente... A situação é análoga quando tentamos passar informação usando qubits em sistemas que são regidos pela Mecânica Quântica.

De maneira similar ao bit no processamento computacional, a unidade de informação quântica é o quantum bit ou qubit. Para um q-bit já não falamos em seus valores, mas em seus estados, podendo estar num estado (representado por)  $|0\rangle$  ou no estado (representado por)  $|1\rangle$ , ou ainda em qualquer superposição deles. Realizações físicas de um q-bit são

dadas por sistemas quânticos que possuem dois autoestados, como por exemplo: fótons (com seus estados ortogonais de polarização), uma partícula com spin  $\frac{1}{2}$ , etc.

A parametrização mais geral para estados puros de um qubit, que define a esfera de estados puros de Bloch [108], é:

$$|\Psi(\theta, \phi)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle. \quad (3.49)$$

Para um espaço de dois qubits, temos o vetorial  $\mathcal{C}^4$ , com projetivo  $\mathcal{P}^3$ , uma variedade de dimensão complexa 3, que corresponde à dimensão real 6 [26].

A Teoria de Bell [90] mostrou que a mecânica quântica, em algumas situações, pode ser incompatível com o conceito clássico de transmissão local de informação e que leva a previsões contrárias àquelas via a interpretação de Copenhagen. Os estados emaranhados, como os pares de Bell, violam as desigualdades de Bell [103], o que mostra que a teoria quântica exibe uma forma de não-localidade, isto é, sistemas quânticos podem afetar um ao outro instantaneamente, independente de sua separação espacial. Contudo, medições realizadas na parte A de um sistema não podem revelar informações sobre medições realizadas na parte B.

Para provar que medições quânticas não permitem a transmissão de informação, considere que a parte A e a parte B compartilham o estado possivelmente emaranhado  $|\Psi_{AB}\rangle$ , e estão realizando medições com os observáveis  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{B}$ , respectivamente. Então a probabilidade de A obter o valor  $x$  e B obter o valor  $y$  é dada por:

$$\begin{aligned} p_{x,y|A,B} &= |\langle x| \otimes \langle y| \Psi_{AB}\rangle|^2 \\ p_{x,y|A,B} &= \langle \Psi_{AB} | (|x\rangle\langle x| \otimes |y\rangle\langle y|) | \Psi_{AB}\rangle \end{aligned} \quad (3.50)$$

Mas fazendo as medições localmente em A tem acesso apenas à distribuição marginal

$$\begin{aligned}
p_{x|A,B} &= \sum_y \langle \Psi_{AB} | (|x\rangle\langle x| \otimes |y\rangle\langle y|) | \Psi_{AB} \rangle \\
p_{x|A,B} &= \langle \Psi_{AB} | \left[ |x\rangle\langle x| \otimes \left( \sum_y |y\rangle\langle y| \right) \right] | \Psi_{AB} \rangle \\
p_{x|A,B} &= \langle \Psi_{AB} | (|x\rangle\langle x| \otimes \mathcal{I}_B) | \Psi_{AB} \rangle
\end{aligned}
\tag{3.51}$$

que não tem mais nenhuma dependência com as medições realizadas em  $B$ , conhecida como condição de não-sinalização: as diferentes partes do sistema não podem trocar informações entre si. Isto é,  $p_{x|A,B} = p_{x|A}$  e  $p_{y|A,B} = p_{y|B}$ .

Outro contraste interessante surge quando confrontamos esse princípio com a teoria do realismo de Einstein [92], que pode ser enunciada como: todos os resultados de medições podem (pelo menos em princípio) ser previstos com probabilidade 1, se tivermos acesso a todas as variáveis ocultas. Ou seja, o resultado de nossas observações já é pré-determinado. Um exemplo, claro e prático, deste princípio é: "quando observamos um pássaro azul, apenas descobrimos que ele é azul". Deve haver uma variável que sabe a cor de todas os pássaros, nós apenas não temos acesso a ela ("Deus não joga dados").

Desta forma, determinado o sistema conjunto  $AB$ , existe uma variável  $\lambda$  tal qual  $p_{x,y|\lambda|a,b}$  seja 1 ou 0, sendo  $p_{x,y,\lambda|a,b}$  a probabilidade dos resultados  $a$  e  $b$  serem obtidos, quando  $\lambda$  é conhecido, dado que as medições  $x$  e  $y$  foram realizadas. Mesmo assumindo a existência da variável  $\lambda$ , sempre vamos ter probabilidades independentes  $p_{x,y|\lambda|a,b} = p_{x|\lambda|a} p_{y|\lambda|b}$ , o que define localidade. E todas correlações de uma teoria realista local satisfazem a condição de não-sinalização.

Como visto, a relação entre emaranhamento e não-localidade é mais delicada do que parece ser. Estes são dois conceitos não equivalentes. Em algumas situações, podem surgir estados emaranhados mistos que a troca de informações é local, isto é, não violam as desigualdades de Bell. Dado um estado emaranhado qualquer,  $\psi_{AB}$ , existe outro estado  $\phi_{AB}$  que não viola a desigualdade de Bell, mas tal que a combinação de tais estados seja não-local. Isso significa que os estados emaranhados têm sempre uma não-localidade escondida que pode ser ativada. Satisfazer a desigualdade de Bell implica em localidade, não satisfazê-la implica em não-localidade, o que significa que um ponto irá alterar outro

ponto do espaço instantaneamente.

### 3.3 Teorema de Bell

O "teorema da impossibilidade de teorias de variáveis ocultas locais (TVOs)" criado pelo norte-irlandês John Stuart Bell (1964) [93, 90] é um dos mais importantes resultados obtidos através de fundamentos da Teoria Quântica desde a criação de uma proposta de interpretação da teoria quântica em termos de "variáveis ocultas" por David Bohm (1952) [109]. Esse teorema e dos experimentos posteriores confirmaram as previsões da teoria quântica sob a interpretação de Copenhagen (em oposição à previsões das VO locais).

Apesar do teorema de Bell tem encontrado diversas aplicações na área de informação quântica, sendo o primeiro resultado quanto à análise da separabilidade de estados puros com dois qubits, é curioso que nenhum avanço significativo ocorreu com relação às suas conseqüências filosóficas desde 1982 [110], quando ficou clara a distinção entre dois tipos de localidade:

- **localidade incontrolável** (independência dos resultados): supõe que a probabilidade de obter o valor  $x$  para a partícula 1 independe do valor  $y$  obtido para a partícula 2;
- **localidade controlável** (independência dos parâmetros): supõe que a probabilidade para a partícula 1 independa do observável sendo medido na outra.

A rejeição da não-localidade incontrolável (independência de resultados) e aceitação da localidade controlável parece ser a interpretação filosófica mais aceita, pois é análogo ao que é visto nos experimentos: o resultado obtido na medição na partícula 1 provoca um colapso não-local da função de onda, que afeta o resultado a ser obtido para a outra partícula [30].

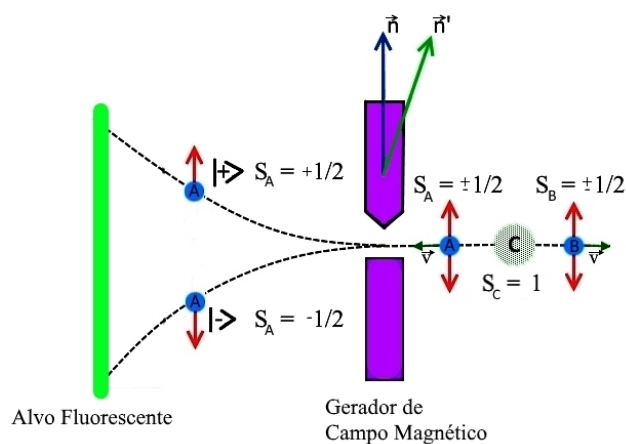
Dentro da Teoria de Bohm [109], dois qubits em um estado emaranhado são caracterizados pelo fato que a medida de um interfere no resultado da medida do segundo, ainda que estejam separados por longas distâncias, o que Albert Einstein definiu como "ação fantasmagórica à distância". De acordo com esta ideia, o primeiro critério de separabilidade sugere que todo estado puro emaranhado viola uma desigualdade de Bell [93].

John S. Bell estudou o trabalho de Bohm, como alguns outros fizeram, mas ficou admirado que "as fórmulas que fornecem as velocidades das partículas exibem o traço

curioso de ter em geral um caráter flagrantemente não-local" [93]. Ele pode extrapolar a teoria através de um questionamento: "será que o traço não-local da teoria realista de Bohm seria uma característica de qualquer teoria realista local?" Em poucos dias, mostrou que sim! Obteve uma prova de impossibilidade para teorias de variáveis ocultas locais.

Para demonstrar o teorema de Bell usaremos o **Gedankenexperiment** de Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm (EPRB) [110]: duas partículas,  $A$  e  $B$ , de spin  $\frac{1}{2}$  são produzidas pelo decaimento de uma molécula  $C$  com spin total 1. Alain Aspect utilizou a interpretação óptica do EPRB Gedankenexperiment para realizar seus experimentos, análises ópticas que culminaram num artigo em 1982 [111]. No experimento de Aspect, as duas partículas de spin se movem livremente em direções opostas conforme a figura 3.3. Posteriormente, o aparato de Stern-Gerlach é aplicado sobre a partícula  $A$ .

Figura 3.3: Gedankenexperiment de Bohm: duas partículas,  $A$  e  $B$ , de spin  $\frac{1}{2}$  são produzidas pelo decaimento de uma molécula  $C$  com spin total 1. Posteriormente, o aparato de Stern-Gerlach é aplicada sobre a partícula  $A$ .



Fonte: Autor, 2017.

Pela conservação do momento angular, a soma dos spins em qualquer direção tem de ser nula. Isso significa que o sistema está no estado "singleto", dado pelo vetor

$$\Psi(\vec{r}_A, \vec{r}_B) = \phi_A(\vec{r}_A)\phi_B(\vec{r}_B)\frac{1}{\sqrt{2}}\{|+\rangle_A|-\rangle_B - |-\rangle_A|+\rangle_B\}, \quad (3.52)$$

onde  $\phi_A(\vec{r}_A)$  e  $\phi_B(\vec{r}_B)$  são funções de pacote de onda que não se sobrepõem e  $\{|\pm\rangle_i\}$  e  $\{|\pm\rangle'_i\}$  são as bases das partículas  $A$  e  $B$  na direção  $\vec{n}$  e  $\vec{n}'$ , respectivamente.

Caso se realize uma medida da partícula  $A$  usando o aparato de Stern-Gerlach com



o campo magnético na direção do vetor unitário  $\vec{n}$ , se obterá como resultado  $|+\rangle_A$ . O colapso da função de onda devido à medição será:

$$\Psi(\vec{r}_A, \vec{r}_B) \rightarrow \phi_A(\vec{r}_A)\phi_B(\vec{r}_B)|+\rangle_A|-\rangle_B. \quad (3.53)$$

Apesar de não ter sido realizada nenhuma medida sobre a partícula  $B$ , pode-se concluir que seu estado é  $|-\rangle_B$ . Mesmo que tivesse sido efetuado a medida do spin  $A$  ao longo de uma nova direção do vetor unitário  $\vec{n}'$ , se o resultado da medida da partícula  $A$  for a autofunção do operador de spin na direção  $|+\rangle'_A$  na direção  $\vec{n}'$ , deve-se atribuir  $|-\rangle'_B$  para o átomo  $B$  que não foi medido.

Para um leitor atento, este comportamento não é estranho, podendo ocorrer inclusive com partículas clássicas que obedecem a algum princípio de conservação, como a conservação de momento angular (semelhante ao nosso exemplo). O que surge como inovador, na abordagem quântica, é que este comportamento se verifica para qualquer orientação dos aparelhos de Stern-Gerlach! Ou seja, logo depois que o par de partículas for emitido, o cientista pode colocar rapidamente os dois aparelhos em qualquer orientação, que ele queira para realizar medidas independentes em cada partícula (sendo a mesma orientação para o par de aparelhos), e o que se observará será a anticorrelação perfeita em qualquer direção.

Esta propriedade de anticorrelação perfeita para qualquer os ângulos não pode ser obtida "classicamente", isto é, por uma teoria realista local. A demonstração disso é justamente o que se conhece como teorema de Bell, que estamos tratando nessa seção.

Se posicionarmos um segundo aparato de Stern-Gerlach agora aplicado sobre a partícula  $B$ , pode-se efetuar as medidas do spin  $B$  ao longo de uma nova direção independente  $\vec{n}'_B$ , de modo que  $\vec{n}'_B \cdot \vec{n}' = \cos \theta$ .

As probabilidades conjuntas [112] das partículas  $A$  e  $B$  são:

$$\begin{aligned} P_{\uparrow_A \uparrow_B}^\Psi &= P_{\downarrow_A \downarrow_B}^\Psi &= \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2}, \\ P_{\uparrow_A \downarrow_B}^\Psi &= P_{\downarrow_A \uparrow_B}^\Psi &= \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Com essas probabilidades construímos o valor esperado do resultado das medidas, definido por:

$$\mathcal{P}(\vec{n}'_B, \vec{n}') = P_{\uparrow_A \uparrow_B}^\Psi + P_{\downarrow_A \downarrow_B}^\Psi - P_{\uparrow_A \downarrow_B}^\Psi - P_{\downarrow_A \uparrow_B}^\Psi = -\cos \theta \quad (3.55)$$

No caso que  $\vec{n}'_B = \vec{n}$ , temos a correlação perfeita e o valor é -1, já que as partículas têm sempre spins opostos em uma dada direção. Analogamente, quando os detectores estiverem orientados em sentidos opostos, o produto das medidas deve ser sempre a média dos produtos será 1.

Agora iremos calcular o que ficou conhecido como média "clássica" do experimento de Bohm, supondo que existem variáveis ocultas. Suponha que a projeção  $\mathcal{P}_A(\vec{n}', \lambda)$  do spin da partícula  $A$  ao longo da direção  $\vec{n}'$  está definida por um parâmetro de realismo  $\lambda$ , fato de  $\lambda$  ser um parâmetro de realismo vem do valor  $\mathcal{P}_A(\vec{n}', \lambda)$  existir antes da medida e não ter sido criado por ela.

O que são, na realidade, os termos  $\mathcal{P}_x(i, j)$ ? Eles podem ser interpretados como os coeficientes de correlação do sistema e exprimem como os resultados obtidos para uma das partículas se correlacionam com os resultados obtidos para a outra partícula. Vejamos três casos simples:

- Se, para cada par de partículas, ambos os detectores sempre fornecerem o mesmo resultado, então  $\mathcal{P}_x(i, j) = 1$ ;
- Se os resultados forem sempre opostos, resultando na anticorrelação perfeita, então  $\mathcal{P}_x(i, j) = -1$ ;
- Se o resultado de um independe do outro, então  $\mathcal{P}_x(i, j) = 0$ .

Esse estado, chamado "singleto", exhibe anticorrelação perfeita,  $\mathcal{P}_x(i, j) = -1$ , e invariância rotacional. Suas propriedades não mudam qualquer que seja a orientação (igual) dos aparatos de Stern-Gerlach.

Em muitas repetições de medidas de  $A$  e  $B$ , a variável oculta varia estatisticamente, o que se conhece como Teoria de Variáveis Ocultas Estocástica Local (TVOE) [93], conforme uma distribuição  $\rho(\lambda)$ , sendo  $\int \rho(\lambda) d\lambda = 1$ . O abandono do "determinismo nas medições" leva a essa classe de TVOs chamada "estocástica". Nesta, as variáveis ocultas (juntamente com o estado quântico) não determinam univocamente os resultados das medições, mas fornecem apenas probabilidades para diferentes resultados.

A maior motivação para se introduzir TVOEs estocásticas surge do fato que elas poderiam formar um conjunto incompleto de variáveis, que se "completariam" (reinstaurando o determinismo nas medições) com variáveis adicionais localizadas em alguma parte, por exemplo nos aparelhos de medição. Deste modo, a média do produto das medições é, então:

$$\mathcal{P}(\vec{n}'_B, \vec{n}') = \int \rho(\lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}', \lambda) \mathcal{P}_B(\vec{n}'_B, \lambda) d\lambda. \quad (3.56)$$

Mas,  $\mathcal{P}_A(\vec{v}, \lambda) = -\mathcal{P}_B(\vec{v}, \lambda)$ , sendo  $\vec{v}$  um vetor qualquer, de modo que:

$$\mathcal{P}(\vec{n}'_B, \vec{n}') = - \int \rho(\lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}', \lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}'_B, \lambda) d\lambda. \quad (3.57)$$

De forma análoga, tomando uma terceira direção  $\vec{n}$ ,

$$\mathcal{P}(\vec{n}, \vec{n}') = - \int \rho(\lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}', \lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}, \lambda) d\lambda, \quad (3.58)$$

e portanto

$$\mathcal{P}(\vec{n}'_B, \vec{n}') - \mathcal{P}(\vec{n}, \vec{n}') = - \int \rho(\lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}', \lambda) \left[ \mathcal{P}_A(\vec{n}'_B, \lambda) - \mathcal{P}_A(\vec{n}, \lambda) \right] d\lambda. \quad (3.59)$$

Como as funções  $\mathcal{P}_A(\vec{n}', \lambda)$ ,  $\mathcal{P}_A(\vec{n}'_B, \lambda)$  e  $\mathcal{P}_A(\vec{n}, \lambda)$  só podem assumir os valores  $\pm 1$ , o valor quadrático delas é sempre 1. Então, podemos introduzir  $\mathcal{P}_A(\vec{n}'_B, \lambda)^2$  na equação 3.3, obtendo:

$$\mathcal{P}(\vec{n}'_B, \vec{n}') - \mathcal{P}(\vec{n}, \vec{n}') = - \int \rho(\lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}', \lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}'_B, \lambda) \left[ 1 - \mathcal{P}_A(\vec{n}'_B, \lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}, \lambda) \right] d\lambda. \quad (3.60)$$

O módulo de 3.60 obedece à desigualdade matemática:

$$\left| \mathcal{P}(\vec{n}'_B, \vec{n}') - \mathcal{P}(\vec{n}, \vec{n}') \right| \leq \int \left| \rho(\lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}', \lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}'_B, \lambda) \left[ 1 - \mathcal{P}_A(\vec{n}'_B, \lambda) \mathcal{P}_A(\vec{n}, \lambda) \right] \right| d\lambda. \quad (3.61)$$

Como a densidade  $\rho(\lambda)$  é positiva,  $\left[1 - \mathcal{P}_A(\vec{n}'_B, \lambda)\mathcal{P}_A(\vec{n}, \lambda)\right] \geq 0$  e  $\left|\mathcal{P}_A(\vec{n}', \lambda)\mathcal{P}_A(\vec{n}'_B, \lambda)\right| = 1$ , pode-se reduzir a equação 3.61 a

$$\left|\mathcal{P}(\vec{n}'_B, \vec{n}') - \mathcal{P}(\vec{n}, \vec{n}')\right| \leq \int \left|\rho(\lambda)\left[1 - \mathcal{P}_A(\vec{n}'_B, \lambda)\mathcal{P}_A(\vec{n}, \lambda)\right]\right| d\lambda. \quad (3.62)$$

que pode ser reescrita como

$$\left|\mathcal{P}(\vec{n}'_B, \vec{n}') - \mathcal{P}(\vec{n}, \vec{n}')\right| \leq 1 + \mathcal{P}_A(\vec{n}, \vec{n}'_B). \quad (3.63)$$

Esta é a desigualdade de Bell [103], que deve ser obedecida por qualquer teoria realista e local (teoria clássica). Por exemplo, se fizermos  $\vec{n}'$  perpendicular a  $\vec{n}'_B$  e  $\vec{n}$  formando 45 graus com o plano formado por pelos outros dois vetores e com o auxílio da equação , tem-se:

$$\begin{aligned} \left|\mathcal{P}(\vec{n}'_B, \vec{n}') - \mathcal{P}(\vec{n}, \vec{n}')\right| &\leq 1 + \mathcal{P}_A(\vec{n}, \vec{n}'_B) \\ \left|-\vec{n}'_B \cdot \vec{n}' + \vec{n} \cdot \vec{n}'\right| &\leq 1 - \vec{n} \cdot \vec{n}'_B \\ \left|0 + \frac{\sqrt{2}}{2}\right| &\leq 1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \sqrt{2} &\leq 1 \end{aligned} \quad (3.64)$$

que representa um resultado absurdo.

Com esses resultados, a interpretação de Copenhagen se mostra incompatível com qualquer teoria de variáveis ocultas locais. A ideia de Einstein, de completar a teoria quântica com TVO que restaurassem o realismo e impusessem a localidade, é impraticável. Ou o realismo ou a localidade deve ser abandonado.

Essa limitação foi removida por Clauser, Horne, Shimony e Holt (1969), o que ficou conhecido como desigualdade CHSH, obtendo uma nova desigualdade com hipóteses menos restritivas [113]. Bell (1971) rededuziu a desigualdade CHSH, com uma análise mais cuidadosa para as hipóteses envolvidas [114]. Na reformulação da CHSH de Bell, a dedução leva em conta que em algumas oportunidades um, ou o outro, ou ainda os dois sistemas de detecção não registrem nenhum dos dois valores possíveis  $\pm 1$ , situação em

que é atribuído 0 como valor da medição. Dessa forma, escolhendo dois pares de direções distintas,  $a$  e  $a'$  para o primeiro subsistema e  $b$  e  $b'$  para o segundo.

Assim, escolhendo as quatro direções distintas  $a$ ,  $a'$ ,  $b$  e  $b'$ , pode-se construir, analogamente a equação 3.3, a seguinte relação:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(a, b) - \mathcal{P}(a, b') &= \int \rho(\lambda) \mathcal{P}_A(a, \lambda) [\mathcal{P}_A(b, \lambda) - \mathcal{P}_A(b', \lambda)] d\lambda \\ &= \int \rho(\lambda) \mathcal{P}_A(a, \lambda) \mathcal{P}_B(b, \lambda) [1 \pm \mathcal{P}_A(a', \lambda) \mathcal{P}_A(b', \lambda)] d\lambda \\ &\quad - \int \rho(\lambda) \mathcal{P}_A(a, \lambda) \mathcal{P}_B(b', \lambda) [1 \pm \mathcal{P}_A(a', \lambda) \mathcal{P}_A(b, \lambda)] d\lambda \end{aligned} \quad (3.65)$$

Utilizando argumentos semelhantes aos que foram usados na desigualdade 3.60, chega-se

$$\begin{aligned} |\mathcal{P}(a, b) - \mathcal{P}(a, b')| &\leq \int \rho(\lambda) [1 \pm \mathcal{P}_A(a', \lambda) \mathcal{P}_B(b', \lambda)] d\lambda \\ &\quad + \int \rho(\lambda) [1 \pm \mathcal{P}_A(a', \lambda) \mathcal{P}_A(b, \lambda)] d\lambda \\ &\leq 2 \pm |\mathcal{P}(a', b') + \mathcal{P}(a', b)|. \end{aligned} \quad (3.66)$$

A relação 3.66 pode ser reescrita, no formalismo CHSH de Bell, como:

$$-2 \leq \mathcal{P}(a, b) - \mathcal{P}(a, b') + \mathcal{P}(a', b') + \mathcal{P}(a', b) \leq 2. \quad (3.67)$$

Escolhas diferentes dentre as direções  $a$ ,  $a'$ ,  $b$  e  $b'$  ao escrever a relação 3.65 produzem ainda outras formas dessa desigualdade, em que o sinal negativo (único) aparece em qualquer das quatro funções de correlação envolvidas. Por exemplo, escolhendo-se que as 4 direções estejam contidas no plano  $zx$ , fazendo com o eixo  $z$  ângulos respectivamente de  $\frac{n\pi}{4}$ , sendo  $n = 0, 1, 2$  e  $3$ , resulta para o estado eq. 3.52 em:

$$\mathcal{P}(a, b) = -\mathcal{P}(a, b') = \mathcal{P}(a', b') + \mathcal{P}(a', b) = -\frac{\sqrt{2}}{2}, \quad (3.68)$$

que no formalismo CHSH de Bell, torna-se o limite da desigualdade CHSH:

$$\mathcal{P}(a, b) - \mathcal{P}(a, b') + \mathcal{P}(a', b') + \mathcal{P}(a', b) \leq 2\sqrt{2}. \quad (3.69)$$

Ou seja, a impossibilidade de Bell afirma que qualquer TVO (ou seja, qualquer teoria realista) que seja local é eliminada por uma desigualdade do tipo:

$$|\mathcal{P}(a, b) - \mathcal{P}(a, b') + \mathcal{P}(a', b') + \mathcal{P}(a', b)| \leq 2\sqrt{2}, \quad (3.70)$$

de modo que o estado e a configuração na realidade tendem a saturar nesse limite quântico, que é conhecido como limite de Tsirelson [115].

### 3.4 Emaranhamento de estados mistos

A maneira mais simples de se descrever estados mistos é considerar uma mistura estatística de estados puros. Ou seja, o sistema quântico que se quer descrever pode ser representado por um conjunto de estados puros  $|\Psi_i\rangle$  normalizados, com probabilidades associadas  $p_i$ .

Durante muitas décadas, pensou-se que emaranhamento e violação das desigualdades de Bell eram a mesma expressão peculiar da Mecânica Quântica: não-localidade. Atualmente, sabe-se que essa equivalência não é completa, sendo válida apenas para estados puros; ou seja, existem estados mistos emaranhados que não violam as desigualdades de Bell.

Como visto anteriormente, um estado puro  $|\Psi\rangle$  de  $N$  partículas é dito separável quando pode ser escrito como:

$$|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\Psi_N\rangle. \quad (3.71)$$

De tal forma, um estado puro é emaranhado quando for não separável. Entretanto este conceito foi estendido para contemplar também estados mistos por R. F. Werner [116]: um estado misto separável, com suas partes classicamente correlacionadas, é aquele que pode ser criado por Operações Locais e Comunicação Clássica (LOCC) [117], operações

que geram correlações clássicas por serem realizadas comunicações clássicas entre as bases que estão criando seus estados. Ou seja,

$$\rho = \sum_k p_k \rho_1^k \otimes \rho_2^k \otimes \cdots \otimes \rho_N^k. \quad (3.72)$$

O operador  $\rho$  é chamado operador densidade [118, 5], que representa uma combinação convexa dos  $N$  subsistemas  $\rho_i^k$ . Utilizando um argumento similar advindo dos estados puros, um estado misto emaranhado é um estado misto não separável.

Um situação prática, para melhor compreensão do que é realmente uma LOCC, seria: supor que eu e você somos partículas quânticas. Ao tentarmos criar uma estratégia de como gerar um estado global conjunto e enganar o grupo de cientistas que pretendem nos analisar e que acham que não podemos nos comunicar. Para ser uma decisão justa (ao menos para nós, que sabemos do combinado), iremos utilizar uma moeda e "tirar cara ou coroa" para decidir os estados que iremos assumir.

Por exemplo, através do resultado do sorteio da moeda se o resultado for cara (cuja probabilidade associada é  $p$ ) nós iremos assumir os estados  $\rho_x^+$  e  $\rho_y^+$  (eu represento o estado  $\rho_x$ , você o estado  $\rho_y$ ), e se der coroa (cuja probabilidade associada é  $1 - p$ ) assumiremos os estados  $\rho_x^-$  e  $\rho_y^-$ . Assim, o estado global, que irá nos representar, é:

$$\rho = p(\rho_x^+ \otimes \rho_y^+) + (1 - p)(\rho_x^- \otimes \rho_y^-) \quad (3.73)$$

É importante mencionar que uma LOCC não é capaz de criar emaranhamento, ela só mantém ou destrói o emaranhamento pré-existente no sistema. Os estados individuais estão correlacionados, mas a correlação entre eles é clássica [116]. O conteúdo da informação, que eu e você compartilhamos para formar o estado global, representaria o conjunto de informações que se entende, segundo a argumentação da TVO, por variáveis ocultas do problema. Outro ponto que pode ser mencionado é que ao analisar o caso particular caracterizado por ter  $p_1 = 1$  e  $p_{k \neq 1} = 0$  na eq. 3.74, ela torna-se:

$$\rho = \rho_1 \otimes \rho_2 \otimes \cdots \otimes \rho_N, \quad (3.74)$$

que representa um estado misto separável que não possui correlação nenhuma entre seus subsistemas.

Para discutirmos as misturas de estados puros, é mais conveniente associar o estado geral do sistema aos operadores projetores  $|\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|$  e as probabilidades  $p_i$ :

$$\rho = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|. \quad (3.75)$$

À primeira vista, é possível referenciar algumas das principais propriedades matemáticas deste operador:

- $0 \leq p_i \leq 1$  ;
- $\rho$  é Hermitiano;
- $\rho$  é definido positivo, ou seja:  $\langle a|\rho|a\rangle \geq 0, \forall|a\rangle$ ;
- $\text{Tr}(\rho) = 1$ .

Através destas propriedades, outras podem ser deduzidas:

1. Os autovalores de  $\rho$  são não-negativos;
2. Os autovalores  $\lambda_i$  de  $\rho$  satisfazem:  $0 \leq \lambda_i \leq 1$ ;
3.  $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$ .

Um impecílio natural no estudo de sistemas de muitas partes é como descrever o resultado de todos os possíveis testes locais realizados sobre cada uma das partes. Para simplificar a descrição, denominaremos a parte de interesse do sistema por  $S$  (de sistema) e o resto do sistema por  $E$  (de entorno).

Quando estudamos sistemas dinâmicos quânticos, as observações são as únicas fontes de informação sobre o estado característico que descreve um sistema arbitrário. Então, são feitas medições com o operador densidade representando a descrição mais completa que se pode dar para tal estado característico. Isso inclui, como caso particular, os estados puros caracterizados por ter  $p_1 = 1$ , situação única onde  $\rho$  é um projetor. Iremos chamar de  $\rho^{(1)} = |\Psi_1\rangle\langle\Psi_1|$ . O valor esperado de um projetor,  $\langle\rho^{(1)}\rangle = \langle\phi|\rho^{(1)}|\phi\rangle = |\langle\Psi_1|\phi\rangle|^2$ ,



é nada mais do que a probabilidade de encontrar um sistema no estado  $|\phi\rangle$  no estado particular  $|\Psi_1\rangle$ .

Sejam  $H_S$  o espaço de estados do sistema  $S$ ,  $H_E$  o espaço de estados do sistema  $E$ , e  $\rho$  o operador densidade que representa o sistema composto inteiro. Então, o estado composto é separável quando pode ser representado por  $\rho = \sum_i^m p_i \rho_i^S \otimes \rho_i^E$  tal que  $\rho_i^S$  e  $\rho_i^E$  são operadores densidades sobre  $H_S$  e  $H_E$  qualquer que seja  $i \in \{1, 2, 3, \dots, m\}$ , e  $(p_1, p_2, \dots, p_m)$  é um vetor de probabilidades. Caso contrário o sistema composto é emaranhado.

A estatística dos resultados de qualquer teste quântico realizado está descrita pelo operador  $\rho$ . Por exemplo, o valor esperado de um teste descrito pelo operador  $A$  será dado por:

$$\langle A \rangle = \mathbf{Tr}(\rho A) \quad (3.76)$$

Testes locais serão dados por operadores da forma  $A = A_s \otimes \mathcal{I}_E$ . O valor esperado destes testes, supondo que o estado global do sistema é descrito na decomposição de Schmidt por  $|\Psi\rangle = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle_S \otimes |\epsilon_i\rangle_E$ , será dado por:

$$\langle A \rangle = \sum_i \lambda_i^2 \langle \psi_i | A_s | \psi_i \rangle = \mathbf{Tr} \left\{ \left( \sum_i |\psi_i\rangle \lambda_i^2 \langle \psi_i| \right) A_s \right\}, \quad (3.77)$$

tal que o operador densidade reduzida é representado por  $\rho_r = \sum_i |\psi_i\rangle \lambda_i^2 \langle \psi_i|$ , que corresponde a um traço parcial (no subsistema  $E$ ) que leva os operadores do espaço geral em operadores do sistema  $S$ . O operador  $\rho_r$  representa a informação sobre a parte do sistema desejado e nenhuma informação do resto do sistema composto. Algo importante a ser mencionado é que, para estados mistos, o conhecimento dos estados parciais não descreve o estado global.

Outro fato interessante é que, se o estado do sistema não for puro, a decomposição apresentada no lado direito da equação 3.77 não é única. Ou seja, um mesmo operador densidade pode ser descrito de diversas formas como um ensemble de estados puros. Resultado já esperado, quando recordamos o que foi discutido acerca da decomposição de estados quânticos na seção 3.1.

A menos que tenhamos alguma informação adicional sobre a preparação do estado, não há maneira física de discriminar entre essas possibilidades. Segredos podem ser escondidos em diversas formas de preparação que levem a um mesmo estado. Os primeiros protocolos de criptografia quântica se utilizam disso [119].

Se o estado misto introduz a ideia de mistura estatística de estados puros, torna-se natural querer comparar dois estados e você pode se perguntar:

**Qual é o que possui maior mistura dos dois?**

Para responder, inicialmente é considerável salientar: se há uma transformação unitária  $O$  tal que  $\rho' = O\rho O^\dagger$ , então  $\rho$  e  $\rho'$  são "igualmente misturados". Muda-se os estados puros que serão usados na descrição, não a forma que eles são misturados.

Serão mais misturados que  $\rho$  todos os estados que podem ser obtidos como combinação convexas dos diversos  $O_k\rho O_k^\dagger$ . Todos os estados que forem descritos como misturas de estados são tão misturados quanto  $\rho$ . Uma vez colocados em ordem decrescente os autovalores  $\lambda_i$  de  $\rho$  e  $\lambda'_i$  de  $\rho'$  é mais misturado que  $\rho$  se, e somente se,

$$\sum_{i=0}^k \lambda'_i \leq \sum_{i=0}^k \lambda_i, \quad \forall k. \quad (3.78)$$

O estado  $\rho'$  será mais misturado que  $\rho$  se existirem operados unitários  $O_K$ , e coeficientes  $u_k \geq 0$ , com  $\sum_k u_k = 1$ , de forma que:

$$\rho' = \sum_k u_k O_k \rho O_k^\dagger. \quad (3.79)$$

O entendimento de quais estados possuem maior ou menor "mistura" é fundamental para quantificação de emaranhamento.

## 3.5 Quantificação de Emaranhamento

### 3.5.1 Critérios para Separabilidade

A partir deste ponto da tese, supomos que o leitor já possui um bom entendimento da ideia de emaranhamento em estados mistos e puros. Então, a pergunta lógica seguinte

seria: **como saber se posso separar, ou não, o estado que estou analisando?**

Para responder isso, suponha a situação:

Se Laura e Bruno procedem testes locais, um estado puro fatorado  $|l, b\rangle$  é separado. Através de operações unitárias locais, qualquer estado puro fatorado deve ser separado, ou melhor, existem procedimentos característicos que podem ser usados para que Laura e Bruno obtenham qualquer estado puro fatorado. Se nos fosse cedido algum sistema confiável de sorteios, deveríamos criar um registro onde os estados  $|l_k, b_k\rangle$  sejam construídos com probabilidades  $p_i$ , de tal forma que qualquer estado poderia ser escrito como

$$\rho = \sum_k p_k |l_k, b_k\rangle \langle l_k, b_k|, \quad (3.80)$$

que pode ser elaborado por Laura e Bruno apenas com LOCC. Estados assim montados, em sua maioria, apresentam correlações, ou seja, os resultados de testes locais realizados por Laura estarão correlacionados a resultados de testes locais realizados por Bruno, o que define as correlações clássicas.

Existem vários métodos que permitem identificar se um estado é, ou não, emaranhado [26]. Alguns deles são ditos operacionais, ou seja, um simples cálculo determina se um dado estado é (ou não) emaranhado. Mas como "every rose has its thorns", é de se esperar que existam estados que se encaixem somente numa classe de critérios mais "complicados", mais técnicos, chamados não-operacionais [120, 121].

O que buscamos, então, é uma "receita" (algum conjunto de critérios operacionais) de separabilidade que, dado um estado  $\rho$ , permita uma resposta: estado separável, ou emaranhado, ou ainda, o que ocorre para alguns critérios: não conclusivo. A estratégia comum é: se  $\rho$  é separável, então possui uma certa propriedade (definida pelo critério assumido). Assim, estados que violam esta propriedade serão emaranhados. Este tipo de procedimento pode levar a testes inconclusivos, no sentido que, se a dita propriedade for verificada, não sabemos (em geral) se o estado é ou não emaranhado. Como exemplo, iremos discutir dois critérios de separabilidade bem comuns na literatura: o primeiro, critério de Peres-Horodecki [122], que utiliza a transposição parcial e outro, critério de Nielson e Kempe [123], que usa a majoração, comparando se os estados bases são mais ou menos emaranhados que o estado global.

Desta forma, a determinação de um critério de separabilidade que seja implementável para qualquer que seja o estado que o sistema se encontre ainda é um problema em aberto, pois as técnicas de análise de estados com um grande número de qubits não apresentam uma sistemática global definida [26, 30].

### Critério de Peres-Horodecki

Este critério operacional surge da observação que se  $\rho$  representa um estado físico, seu complexo conjugado  $\bar{\rho}$  também é um estado físico [124, 122]. Usa-se então a operação chamada de transposição parcial do estado global, se

$$\rho = \sum_{m,n,u,v} \rho_{m,n,u,v} |m, u\rangle \langle n, v|, \quad (3.81)$$

sua transposta parcial (neste caso, em relação ao segundo fator) será:

$$\rho^{TB} = \sum_{m,n,u,v} \rho_{m,n,u,v} |m, v\rangle \langle n, u|, \quad (3.82)$$

onde foi feita apenas a troca entre os segundos índices dos produtos tensoriais,  $v \longleftrightarrow u$ . A transposição parcial é uma operação linear no espaço real dos operadores Hermitianos.

O critério de Peres-Hodericki assume que se  $\rho$  for separável, então  $\rho^{TB}$  não possuirá valores negativos. Em outras palavras, se  $\rho^{TB}$  tem valores negativos, é garantido que  $\rho$  é emaranhado. Esse resultado é válido independente de qual parte será usada para a transposta parcial,  $\rho^{TA} = (\rho^{TB})^T$ . Entretanto, se a dimensão de  $\rho$  for maior que 6, esse teste é completamente inconclusivo.

Considere agora um estado de 2-qubits, como exemplo da aplicação da técnica, escrito em termos de um dos estado de Werner [116]:

$$F = p|\psi^-\rangle \langle \psi^-| + (1-p)\frac{I}{4}, \quad (3.83)$$

sendo  $|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-+\rangle - |+-\rangle)$  e  $I$  é uma matriz identidade de dimensão 4. Na representação matricial, temos:

$$\rho = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1-p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p+1 & -2p & 0 \\ 0 & -2p & p+1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-p \end{bmatrix} \quad (3.84)$$

e sua transposta parcial (em relação ao segundo fator) será:

$$\rho^{T_B} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1-p & 0 & 0 & -2p \\ 0 & p+1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p+1 & 0 \\ -2p & 0 & 0 & 1-p \end{bmatrix} \quad (3.85)$$

, que possui seu menor autovalor dado por  $\frac{1-3p}{4}$ . Desta forma, o estado  $\rho$  é emaranhado (pelo critério de Peres-Horodecki) para  $p > \frac{1}{3}$ . Contudo, um grupo de pesquisadores conhecido como família Horodecki mostrou que a suficiência não se verificava para tais análises generalizadas [125]

De forma mais abrangente, o critério de Peres-Horodecki pode ser citado como: **um estado  $\rho$  é separável se, e somente se, para qualquer mapa (operador que age no espaço dos operadores) positivo  $M$ ,  $M\rho$  é positivo** [124, 122].

Um mapa  $M$  é um operador que age nos espaços dos operadores, ou seja, se  $R$  é um operador, então  $MR$  também o é. Um mapa é positivo quando leva operadores positivos em operadores positivos. De acordo com esses conceitos, podemos concluir que a transposição utilizada por Peres é um mapa positivo, uma vez que este procedimento não modifica o conjunto dos autovalores de uma matriz [124, 122].

### Critério de Nielsen-Kempe

Outro importante critério operacional, criado por Nielsen e Kempe [123], é conhecido como critério da majoração da separabilidade dos estados. A forma usual de quantificar a desordem em sistemas físicos é através do uso de medidas entrópicas. Do ponto de vista clássico, se um sistema tem duas partes, partes  $i$  e  $j$ , a entropia do sistema global  $S_2$  não pode ser menor que a entropia de cada subsistema  $S_i$ . No contexto quântico, a entropia

de von Neuman [126],  $S(p) = -\mathbf{Tr}[p \log p]$  é extensamente utilizada em várias situações. Assim, pode-se definir uma entropia condicional  $S(2|i) = S_2 - S_j$  que é a entropia do sistema  $i$ , uma vez que é conhecida a entropia da parte  $j$  do sistema [127]. Quando se fala de probabilidades clássicas,  $S(2|i)$  é sempre positiva. De forma que a variação de entropia de um sistema isolado também seja sempre positiva ou nula, segundo a 2ª lei da termodinâmica.

Supondo, que os estados não são emaranhados tem-se  $S(2|i) = S_i$ , sendo  $S(2|i) > 0$ . Entretanto, se  $S(2|i) < 0$ , então o estado global  $\rho_2 = \sum_k p_k \rho_i^k \otimes \rho_j^k$  é não separável. Para estados separáveis,  $\rho_2$  é necessariamente mais misturado que os estados locais  $\rho_i$  e  $\rho_j$ . Ou seja, se  $\rho_i$  (ou  $\rho_j$ ) for mais misturado que  $\rho_2$ , então  $\rho_2$  é um estado não-separável.

**Critério entrópico:** Se  $S(2|i) = S_2 - S_j < 0$ , então  $\rho_2$  é um estado emaranhado.

Considere o conjunto de todas as distribuições de probabilidades possíveis para uma variável aleatória  $\Gamma$ , o espaço amostral de  $\Gamma$ . Vamos considerar o caso em que o espaço amostral possua  $N$  elementos, sendo a probabilidade de cada resultado ( $\gamma_k$ ) ser obtido representada por  $p_k = P(\Gamma = \gamma_k)$ .

O conjunto de todas as distribuições de probabilidades  $p_k$  para  $\Gamma$  é o conjunto de todos os vetores em  $\mathcal{R}^N$  com coordenadas não-negativas e que somam um. Esse conjunto é um invólucro convexo de  $(N - 1)$  pontos em  $\mathcal{R}^N$ . A envoltória convexa será denotada por  $\Theta$ .

Para dois vetores  $\vec{s}$  e  $\vec{e} \in \Theta$ . Sejam  $\vec{s}^\downarrow$  e  $\vec{e}^\downarrow$  os vetores obtidos de  $\vec{s}$  e  $\vec{e}$  com as coordenadas ordenadas em ordem decrescente. Dizemos que  $\vec{s}$  é majorado por  $\vec{e}$ ,  $\vec{s} \prec \vec{e}$ , ou que  $\vec{s}$  majora  $\vec{e}$ ,  $\vec{s} \succ \vec{e}$ , se para todo  $k$  tem-se

$$\sum_{i=1}^k \vec{s}^\downarrow \leq \sum_{i=1}^k \vec{e}^\downarrow. \quad (3.86)$$

**Critério da Majoração [123]:** Sejam  $\rho$  o operador densidade que representa composto,  $\vec{v}$  é o vetor cujas entradas são os autovalores de  $\rho$ ,  $\vec{s}$  e  $\vec{e}$  vetores cujas componentes são os autovalores dos operadores densidade reduzidos  $\rho_S$  e  $\rho_E$ . Se é separável, então  $\vec{v}^\downarrow \prec \vec{s}^\downarrow, \vec{e}^\downarrow$ .

Diz-se então que  $x$  é "mais misturado" que  $z$  quando  $z \succ x$ . Podemos agora enunciar o critério de Nielsen e Kempe:

**Critério de Nielsen e Kempe:** Se  $\rho_2$  é separável, então:  $\lambda(\rho_i) \succ \lambda(\rho_2)$  e  $\lambda(\rho_j) \succ \lambda(\rho_2)$ , onde  $\lambda(\rho_2)$ ,  $\lambda(\rho_i)$  e  $\lambda(\rho_j)$  representam os autovalores de  $\rho_2$  e de suas matrizes reduzidas, respectivamente.

### 3.5.2 Propriedades dos quantificadores de emaranhamento

Todos os critérios apresentados até então servem para atestar apenas emaranhamento em sistemas de duas partes. Quando estamos tratando com emaranhamento entre diversas partes precisamos ser mais cuidadosos e especificar a qual emaranhamento estamos nos referindo.

Como o emaranhamento quântico é um recurso vantajoso de manipulação ou transmissão de informação, em relação aos meios "clássicos" de manipulação e transmissão, torna-se imprescindível quantificá-lo, ou seja, dizer quanto emaranhamento está presente e disponível para ser utilizado em um sistema físico de muitas partes.

Chamamos de  $k$ -separável, todo estado que pode ser escrito sob a forma de uma combinação convexa de estados que produtos de  $k$  produtos tensoriais. Alternativamente, dizemos que tal estado pertence ao conjunto  $S_k$ . Cada um dos  $S_k$  é convexo e fechado e dado  $\rho$  não percente a  $S_k$ , existe um hiperplano  $C$  que separa  $\rho$  de  $S_k$  [128]. Ou seja, existe algum operador Hermitiano  $C$  tal que  $\mathbf{Tr}(C\rho) > 0$  e  $\mathbf{Tr}(C\sigma) \geq 0$  para qualquer  $\sigma$  pertencente a  $S_k$ . Sendo assim, podemos chamar  $C$  testemunhas de emaranhamento, a solução teórica para a questão de separabilidade de estados.

Toda vez que  $\rho$  estiver emaranhado, existirá algum  $C$  que irá testemunhar isso. Entretanto não há uma testemunha universal [129].

Uma das formas sistemáticas de se construir a otimização das testemunhas [130] para estados puros é através da busca pelo elemento ótimo,  $C_\psi = \Lambda^2 - |\psi\rangle\langle\psi|$ . Pela condição que  $\mathbf{Tr}(C\sigma) \geq 0$  se  $\sigma$  é separável, temos que  $\Lambda^2 = \max_{\sigma \in S} (||\langle\sigma|\psi\rangle||^2)$ .

Diversos autores discutem qual seria o conjunto completo de requerimentos naturais que um quantificador de emaranhamento  $C$  deve satisfazer. Apesar de não existir um consenso geral, existem sete condições que são importantes para uma quantificação adequada do emaranhamento entre as partes do sistema:

- $C(\rho)$  deve ser uma função contínua de  $\rho$ ;
- Se  $\rho$  é separável, então o quantificador de emaranhamento  $C(\rho) = 0$ , pois apenas

estados não-separáveis podem possuir um valor não-nulo de emaranhamento;

- A unidade de emaranhamento o ebit, do inglês entanglement bit, de forma que o estado de Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm [92],  $|\Psi_{EPRB}\rangle$ , com máximo emaranhamento possuirá  $C(|\Psi_{EPRB}\rangle\langle\Psi_{EPRB}|) = 1$  ebit. Contudo, nas teorias de informação é mais comum a consideração dos medidores de emaranhamento como grandezas adimensionais;

Por exemplo, se o estado puro é representado por  $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{j=0}^{d-1} |j, j\rangle$  então  $C(|\Psi\rangle\langle\Psi|) = \log d$  ebits.

- Operações locais com comunicação clássicas não podem gerar emaranhamento. Podem sim gerar correlações, mas de uma maneira que possam ser descritas classicamente;
- Operações infinitesimais sem comunicação clássica geram, ou destroem, quantidades infinitesimais de emaranhamento;
- Denota-se por  $\rho^{\otimes n}$  o estado com  $n$  cópias idênticas de um estado  $\rho$ , produto tensorial das  $n$  réplicas de  $\rho$ . Sendo assim,  $C(\rho^{\otimes n}) = nC(\rho)$ . Ou seja,  $n$  cópias independentes de um estado qualquer possuem  $n$  vezes a quantidade de emaranhamento de cada cópia;
- Se dois sistemas compartilham estados  $\rho$  e  $\sigma$  sobre sistemas independentes, podemos dizer que eles compartilham  $\rho \otimes \sigma$  e os quantificadores  $C$  devem obedecer:  $C(\rho \otimes \sigma) \leq C(\rho) + C(\sigma)$ ;
- $C$  é uma função convexa no espaço de operadores, de tal forma que  $C(\lambda\rho + (1-\lambda)\sigma) \leq \lambda C(\rho) + (1-\lambda)C(\sigma)$ .

Combinações convexas são mais misturadas, e, portanto, menos emaranhadas que seus estados extremos.

### 3.5.3 Emaranhamento de formação

O emaranhamento de formação faz uso de dois conceitos:



- Todo estado pode ser escrito como qualquer uma das diversas combinações convexas de estados puros,  $\rho = \sum_i \mu_i |\Psi\rangle\langle\Psi|$ . Não havendo informação adicional sobre a preparação do estado  $\rho$ , deve-se considerar todas as possíveis decomposições;
- Quando fala-se em estados puros bipartidos, a quantificação entrópica de emaranhamento pode partir da combinação do espectro de Schmidt  $\{\lambda_i\}$  e do conceito de entropia de von Neuman [126],  $S(\Psi) = -\sum_i \lambda_i^2 \log_2(\lambda_i^2)$ . Desta forma, torna-se um bom quantificador inicial de emaranhamento para um estado desconhecido [89, 126].

As primeiras propostas para se quantificar o emaranhamento eram baseadas de sua utilização e do esforço requerido para a produção de estados emaranhados. Deste modo, suponha um protocolo LOCC  $\Lambda$  que leve  $M$  pares maximamente emaranhados em  $N$  pares  $\rho_{AB}$  (os  $\rho_{AB}$  são criados através de operações LOCC para que os  $M$  pares possam ser compartilhados entre duas partes). Assim concluímos que o emaranhamento de  $\rho_{AB}$  é  $C(\rho_{AB}) = \frac{M}{N}$  ebits. Entretanto, pode existir outro protocolo,  $\Lambda'$ , que obtenha a transformação desejada, a um custo menor. O custo de emaranhamento  $C_C(\rho_{AB})$  é definido como

$$C_C(\rho_{AB}) = \inf_{\Lambda'} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{M}{N} \right) \quad (3.87)$$

O emaranhamento destilável,  $D$ , seria o inverso de  $C_c$ : quer-se saber quantos pares EPR podem ser extraídos (destilados) de  $N$  pares de um estado  $\rho_{AB}$  (tomando-se o limite que  $M$  tende ao infinito), usando somente LOCC. Curiosamente há alguns estados que possuem o que foi chamado de emaranhamento preso [131], ou seja, que não pode ser destilado.

O emaranhamento de formação é um quantificador bastante interessante para o emaranhamento. Contudo, por envolver um processo de extremização sobre todas as possíveis decomposições de um estado, torna-se um quantificador não-operacional quando tratamos de emaranhamento entre um grande número de partes do sistema. Exceto para o caso de dois qubits, onde já é sabido um algoritmo para calcular o emaranhamento de formação criado por Wootters [132].

Como o próprio nome sugere, o emaranhamento de formação faz uso da idéia de como

são construídos os estados quânticos. É possível escrevermos qualquer estado quântico como uma soma convexa de estados puros:

$$\rho_{AB} = \sum_i p_i |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (3.88)$$

sendo  $\{p_i\}$  é uma distribuição de probabilidades. Em seguida podemos calcular o emaranhamento de cada estado puro na decomposição e obter a média destes emaranhamentos, a partir da entropia de von Neuman  $S_e$ , dada pelas probabilidades  $\{p_i\}$ :

$$\bar{C}_d(p_i, \{|\psi\rangle\}) = \sum_i p_i S_e(\psi_i). \quad (3.89)$$

O emaranhamento de formação do estado  $\rho$  é dada pela minimização do emaranhamento de decomposição,  $C_d$ . E o emaranhamento de formação será definido como a minimização de  $C_d$  [133] sobre todas essas possíveis decomposições:

$$C_f(\rho) = \inf_d [\bar{C}_d(\{\mu_i, \Psi_i\})]. \quad (3.90)$$

É possível relacionar a versão regularizada de  $C_f(\rho^{\otimes n})$  ao custo de emaranhamento,  $C_c$ , isto é:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{C_f(\rho^{\otimes n})}{n} = C_c(\rho). \quad (3.91)$$

Por conta do processo de minimização, infelizmente, o cálculo de  $C_f$  torna-se intratável na maioria das situações. Sendo assim, busca-se achar um método prático para avaliar o emaranhamento de formação para estados gerais. Em seguida irá se discutir o método para obtenção de  $E_f$  para 2 qubits.

### 3.6 Concorrência

Em 1997, Hill e Wootters demonstraram a existência de uma fórmula para se calcular o emaranhamento de formação para qualquer estado de 2 qubits [132]. Neste artigo, eles

criaram um novo quantificador de emaranhamento: a concorrência,  $C$ , que está diretamente ligada à semelhança entre um estado e seu "estado invertido", onde cada parte do seus vetores de Bloch foram rotacionada em  $180^\circ$  em relação a um eixo específico.

Para um único qubit, o estado invertido pode ser expresso como:

$$|\bar{\phi}\rangle = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} |\phi^*\rangle = \sigma_y |\phi^*\rangle, \quad (3.92)$$

em que  $|\phi^*\rangle$  é o vetor formado a partir de  $|\psi\rangle$  conjugando seus coeficientes em alguma base.

Para estados puros,  $|\Psi\rangle$ , a concorrência tem uma definição simples:

$$C(\Psi) = |\langle \Psi | \bar{\Psi} \rangle|, \quad (3.93)$$

onde  $|\bar{\Psi}\rangle$  representa o estado invertido de  $|\Psi\rangle$ . A concorrência de um vetor qualquer  $|w\rangle$  é dada por

$$C(\Psi) = \frac{|\langle w | \bar{w} \rangle|}{|\langle w | w \rangle|}, \quad (3.94)$$

Supondo que  $\rho$  é a matriz de densidade que descreve um estado quântico misto, o estado invertido  $\bar{\rho}$  em relação ao eixo "y" será definido por:

$$\bar{\rho} = \sigma_y \otimes \sigma_y \rho^* \sigma_y \otimes \sigma_y, \quad (3.95)$$

onde  $\sigma_y$  representa a matriz de Pauli,  $\sigma_i$ , na direção "y" e  $\rho^*$  é o complexo conjugado de  $\rho$ . No intuito de exemplificar o estado invertido  $\bar{\rho}$ , considere o exemplo simples de dois spins  $\frac{1}{2}$ , onde  $\mathcal{H}_i = \{|\uparrow_i\rangle, |\downarrow_i\rangle\}$  e  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . A combinação do princípio da superposição aliado ao produto tensorial nos leva a um autoestado não normalizado mais geral formado por:

$$|\Psi\rangle = a_1 |\uparrow\uparrow\rangle + a_2 |\uparrow\downarrow\rangle + a_3 |\downarrow\uparrow\rangle + a_4 |\downarrow\downarrow\rangle. \quad (3.96)$$

Fica claro que nem todos os coeficientes  $a_i$  da eq. 3.96 podem ser fatoráveis, mais explicitamente os coeficientes  $a_2$  e  $a_3$  não podem ser fatoráveis. Quando os coeficientes são fatoráveis são conhecidos como estados produto, enquanto os demais estados são chamados de estados emaranhados. O estado invertido será:

$$|\bar{\Psi}\rangle = \sigma_y \otimes \sigma_y |\Psi\rangle = -a_4 |\uparrow\uparrow\rangle + a_3 |\uparrow\downarrow\rangle + a_2 |\downarrow\uparrow\rangle - a_1 |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (3.97)$$

A matriz  $\bar{\rho}$  pode ser expressa como

$$\bar{\rho} = |\bar{\Psi}\rangle\langle\bar{\Psi}| = \begin{bmatrix} |a_4|^2 & -a_4^* a_3 & -a_4^* a_3 & a_4^* a_1 \\ -a_3^* a_4 & |a_3|^2 & a_3^* a_2 & -a_3^* a_1 \\ -a_2^* a_4 & a_2^* a_3 & |a_2|^2 & -a_2^* a_1 \\ a_1^* a_4 & -a_1^* a_3 & -a_1^* a_2 & |a_1|^2 \end{bmatrix} \quad (3.98)$$

Para estados mistos a definição da concorrência  $C(\rho)$  é um pouco menos direta, envolvendo os autovalores da matriz  $R = \sqrt{\rho^{\frac{1}{2}} \times \bar{\rho} \times \rho^{\frac{1}{2}}}$ . A diagonalização da matriz  $R$  nos proporciona os autovalores  $\lambda_i$  que serão organizados em ordem decrescente para gerar definição da concorrência para o estados mistos  $\rho$ , dada por:

$$C(\rho) = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}. \quad (3.99)$$

A concorrência  $C$  varia de 0, para estados separáveis, a 1, para estados maximamente emaranhados. A concorrência é invariante por transformações unitárias locais. Conhecida a concorrência, o emaranhamento de formação pode ser diretamente obtido, primeiro por uma mudança de escala, e depois pela passagem a uma forma entrópica como a definição do emaranhamento de formação:

$$E(C) = -\left(\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2}\right) \log\left(\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2}\right) - \left(\frac{1 - \sqrt{1 - C^2}}{2}\right) \log\left(\frac{1 - \sqrt{1 - C^2}}{2}\right), \quad (3.100)$$

que permite calcular diretamente o emaranhamento de formação para um sistema de dois qubits, sem a necessidade de processos de extremização.

Na representação tomográfica [134, 135], também se pode reescrever  $\bar{\rho}$  como:

$$\bar{\rho} = \frac{1}{4} \sum_{ij} (-1)^{i+j} c_{ij} \mathbf{S}_{ji}, \quad (3.101)$$

com  $c_{00} = 1$  e os demais coeficientes podem ser obtidos usando  $c_{ij} = \text{Tr}\{\rho \mathbf{S}_{ij}\}$ . Os coeficientes  $c_{0j}$  e  $c_{i0}$  determinam os estados locais (aqueles obtidos por medições em apenas uma das partes do sistema separadamente das demais). A maneira de obter tais coeficientes tomograficamente envolve sempre um operador  $\sigma_i$  em uma das partes e a identidade na outra, o que caracteriza uma medição local. Toda as informações sobre as correlações, e emaranhamento em particular, do sistema estão nos tensores  $c_{ij}$ , sendo  $i$  e  $j$  diferentes de zero.

Utilizando a representação tomográfica e supondo uma matriz densidade dos spins localizados nos sítios  $i$  e  $j$  com invariância translacional, pode-se representar a matriz de densidade na base  $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$  [29, 136, 137]:

$$\bar{\rho} = \begin{bmatrix} u^+ & 0 & 0 & \langle S_x^i S_x^j \rangle - r \\ 0 & w^+ & \langle S_x^i S_x^j \rangle + r & 0 \\ 0 & \langle S_x^i S_x^j \rangle + r^* & w^- & 0 \\ \langle S_x^i S_x^j \rangle - r^* & 0 & 0 & u^- \end{bmatrix} \quad (3.102)$$

onde:

$$\begin{aligned} u^\pm &= \frac{1 \pm 2\langle S_z^i + S_z^j \rangle + 4\langle S_z^i S_z^j \rangle}{4} \\ w^\pm &= \frac{1}{4} - \langle S_z^i S_z^j \rangle \pm \frac{1}{2}\langle S_z^i - S_z^j \rangle \\ r &= \langle S_y^i S_y^j \rangle + i\left(\langle S_x^i S_y^j \rangle + \langle S_y^i S_x^j \rangle\right) \end{aligned} \quad (3.103)$$

A concorrência associada a tal matriz de densidade tem a forma:

$$C_{ij} = 2 \max\{0, l_1, l_2\}, \quad (3.104)$$

sendo

$$l_1 = \sqrt{\left(\langle S_x^i S_x^j \rangle - \langle S_y^i S_y^j \rangle\right)^2 + \left(\langle S_x^i S_y^j \rangle + \langle S_x^i S_y^j \rangle\right)^2} - \sqrt{\left(\frac{1}{4} - \langle S_z^i S_z^j \rangle\right)^2 - \frac{1}{4} \left(\langle S_z^i - S_z^j \rangle\right)^2} \quad (3.105)$$

$$l_2 = \sqrt{\left(\langle S_x^i S_x^j \rangle + \langle S_y^i S_y^j \rangle\right)^2 + \left(\langle S_x^i S_y^j \rangle - \langle S_x^i S_y^j \rangle\right)^2} - \sqrt{\left(\frac{1}{4} + \langle S_z^i S_z^j \rangle\right)^2 - \frac{1}{4} \left(\langle S_z^i + S_z^j \rangle\right)^2}. \quad (3.106)$$

Quando consideramos a concorrência de dois spins- $\frac{1}{2}$  interagindo por um acoplamento de Heisenberg num modelo  $XXZ$  [36, 51], temos que:

- $\langle S_x^i S_x^j \rangle = \langle S_y^i S_y^j \rangle$  ;
- $\langle S_z^i - S_z^j \rangle = \langle S_y^i S_x^j \rangle = \langle S_x^i S_y^j \rangle = 0$  ;
- $\langle S_z^i + S_z^j \rangle = 2m_z$ .

Consequentemente, a expressão da concorrência, equação 3.104, torna-se:

$$C_{ij} = \max \left\{ 0, 4|\langle S_x^i S_x^j \rangle| - 2\sqrt{\left(\frac{1}{4} + \langle S_z^i S_z^j \rangle\right)^2 - m_z^2} \right\}, \quad (3.107)$$

que é a expressão que usaremos para avaliar o emaranhamento bipartido dos spins primeiros vizinhos,  $S^i$  e  $S^j$ , conectados por um acoplamento de Heisenberg nesta tese.

# GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

## 4.1 Teoria de Bandas de Energia

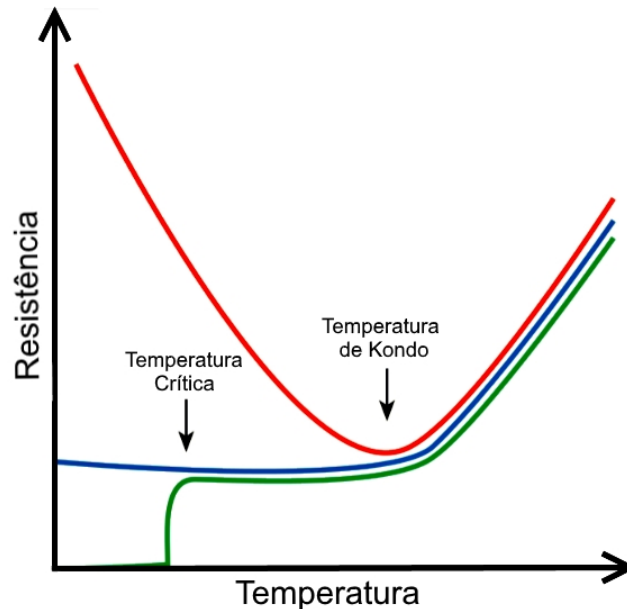
Com a redução da agitação térmica, metais puros tendem a diminuir sua resistência ao transporte de elétrons. Sendo assim, seria plausível esperar que, a medida que fossemos reduzindo a temperatura, a resistência fosse a zero. No entanto, quanto mais nos aproximamos da temperatura zero, metais do grupo do cobre têm sua resistência saturada num valor não nulo [1], devido a presença de defeitos estáticos no material, como ilustrado na figura 4.1 pela curva em azul.

Resultados experimentais indicam que, quando íons de impurezas magnéticas como ferro, cobalto ou níquel são dissolvidos em uma matriz metálica, observamos um mínimo no valor da resistência para um certo valor da temperatura, conhecida como temperatura de Kondo [138]. Este feito ocorre quando há interação entre elétrons de condução (normalmente dos orbitais mais internos: s, p ou d) e elétrons fortemente localizados (provenientes de orbitais mais externos: f), como ilustrado na figura 4.1 pela curva em vermelho.

Apesar dos momentos observados poder variar de um metal para outro, sua formação depende, principalmente, das propriedades do metal hospedeiro. Para impurezas magnéticas dissolvidas em isolantes, sempre haverá a formação de momentos de acordo com a regra de Hund [139].

O aumento da resistência quando diminuimos a temperatura, que ocasiona o efeito Kondo [140], é atribuído a impurezas magnéticas diluídas na matriz metálica que atuam como centros espalhadores, dificultando a circulação de corrente elétrica no material.

Figura 4.1: Diminuição da resistência, de metais do grupo do cobre, até um valor constante com o redução da temperatura (curva em azul). Outros grupos de compostos metálicos tornam-se supercondutores abaixo de um certo limiar, conhecido como temperatura crítica (curva em verde). Em outro grupo de metais, que apresentam impurezas magnéticas, a resistência apresenta um mínimo, em uma temperatura conhecida como temperatura de Kondo. Figura adaptada de [1].



Fonte: Autor, 2017.

Kondo mostrou que esta interação entre os momentos locais e os elétrons de condução é favorável ao alinhamento antiferromagnético. As impurezas magnéticas se agrupam com os elétrons de condução formando singletos localizados blindando as mesmas. Isto faz do efeito Kondo um efeito que irá competir com o magnetismo em algumas situações [1].

Experimentalmente, observou-se que nas amostras que apresentavam formação de momentos localizados, além da susceptibilidade de Pauli [141], havia também uma susceptibilidade que dependia fortemente da temperatura e que podia ser ajustada por uma lei de Currie-Weiss [142] da forma

$$\chi = \frac{\mu_{eff}^2}{3k(T - \theta)}, \quad (4.1)$$

onde  $\mu_{eff}$  é o momento magnético efetivo e  $\theta$  a temperatura de Curie, que independem da concentração de impurezas. Se a susceptibilidade não depender da temperatura, não haverá formação de momento localizado.

Logo depois descobriu-se que as bandas de condução dos metais eram tão largas que



geralmente os níveis de energia das impurezas se encontravam em seu interior e, conseqüentemente, esses estados não poderiam estar verdadeiramente localizados [143]. Em geral, as energias dos estados localizados estão no interior da banda de condução do metal hospedeiro e a teoria de um elétron não é capaz de descrever a localização dos estado da impureza.

Em 1958, surgiu uma teoria para explicar esse fenômeno o que ficou conhecido como o conceito de estado virtual, criando por Jacques Friedel [143], um estado construído a partir de elétrons livres do contínuo. Tal estado não pode estar verdadeiramente localizado, pois tem uma largura  $\Delta$  e a partir de um tempo  $\tau_\Delta$  decai novamente em um estado contínuo.

A formação de momentos localizados se resolve, pela determinação das condições segundo os quais os estados virtuais para elétrons com "spin para cima" não serão equivalentes aos estados virtuais para elétrons com "spin para baixo" e um momento magnético existirá no estado da impureza.

Na técnica de Grupo de Renormalização (GR) [144] aplicada a esses modelos com impurezas diluídas, a banda de energia é representada por vários segmentos de bandas menores com comprimentos que decaem exponencialmente próximos da energia de Fermi  $\epsilon_F$  [145].

Sabemos que um sistema metálico no estado fundamental  $\Psi_0$ , isto é a  $T = 0$ , possui todos os níveis abaixo de  $\epsilon_F$  ocupados. Acima deste nível todos os estados estão vazios. Assim, podemos estudar o comportamento da banda de condução analisando as várias escalas de energia que podem ser excitadas termicamente.

Partindo do estado  $\Psi_0$ , à medida que a temperatura cresce, a agitação térmica faz a energia de excitação aumentar, tornam-se acessíveis escalas de energia crescentes, sendo que a cada uma dessas escalas o número de níveis acessíveis é infinito, pois a banda de condução é contínua.

Esse fato traz dificuldade para a abordagem numérica: assim é necessário que se faça uma seleção adequada desses novos níveis. A ideia central da técnica do grupo de renormalização é substituir a banda de condução contínua por uma banda discreta para que o Hamiltoniano,  $H$ , seja diagonalizável numericamente. Mais ainda, que os níveis de energia estejam dispostos em uma escala logarítmica de energia com origem em  $\epsilon_F$ . A ideia por trás da escolha da escala logarítmica é manter uma mesma estrutura para o Hamiltoniano ao longo da diagonalização iterativa, fazendo-se essa discretização

logarítmica da banda de condução com o intuito de preservar uma característica da banda: ser invariante por transformação de escala.

A discretização logarítima da banda de condução é o que ocasiona a convergência do método de GR. Em particular, a discretização da banda de condução obriga que os coeficientes decaiam exponencialmente com  $n$ . Desta forma, se faz necessário introduzir um parâmetro adimensional  $\Lambda > 1$ , a razão entre duas energias discretas sucessivas, controla essa aproximação e define o tempo de custo de um dado cálculo computacional.

Para implementar o procedimento de discretização, substituiremos o contínuo da banda por níveis discretos que apresentam energias  $\pm\Lambda^{-m-z}$ , onde  $m = 0, 1, 2, 3, \dots$  e  $0 < z < 1$ , e identifica dentro do espaço de energia, ou seja, estabelecendo como  $\Lambda^{-m}$  o limite superior, o restante do espectro é obtido através da divisão sucessiva por  $\Lambda$ . Quando  $\Lambda \rightarrow 1$  o limite contínuo é recuperado, mas enquanto o procedimento se torna exato, o custo do cálculo da função de partição de um Hamiltoniano modelo se torna ilimitado. Por outro lado, aumentando-se  $\Lambda$ , o custo diminui exponencialmente com  $\frac{1}{\ln \Lambda}$ , às custas da precisão computacional.

Argumentos analíticos [140], felizmente, mostram que as médias termodinâmicas dependem fracamente do parâmetro de discretização  $\Lambda$ . Logo, espera-se que médias numéricas com  $\Lambda \leq 3$  estejam dentro de alguns por cento do limite exato. Por isso, o limite superior,  $\Lambda = 3$ , tem sido tomado como padrão para os cálculos de susceptibilidade.

No limite superior, cálculos numéricos das propriedades termodinâmicas para modelos de uma impureza de spin degenerado são econômicos. Infelizmente, o custo computacional aumenta exponencialmente com a degenerescência dos estados de condução e com o número de impurezas [146]

Finalmente, para responder o efeito ilustrado na figura 4.1 pela curva em verde (supercondutividade nos materiais), John Bardeen, Leon Cooper e J. Robert Schrieffer (1957)[147] proporam uma explicação que ficou conhecida como Teoria BCS. Esta teoria relaciona a supercondutividade com um efeito causado pela atração efetiva entre elétrons. O mecanismo para esta atração se dá através dos fônons da rede [148], fazendo com que os elétrons se agrupem em pares, chamados de pares de Cooper. Este estado de elétrons emparelhados teria uma energia menor que a energia de Fermi criando um gap que impediria os elétrons de condução de sofrer espalhamentos pelas impurezas da rede.

Atualmente há outras aplicações para o grupo de renormalização, sendo que a maior

parte das pesquisas que se baseam em grupos de renormalização são voltadas às áreas de física nuclear, cosmologia, física computacional. Em física nuclear é utilizado para estudar sistemas de muitos corpos nucleônicos, bem como para interação entre quarks de muitos sabores [149].

## 4.2 Modelos com Impurezas Magnéticas Diluídas

A busca por uma forma analítica precisa para se calcular os expoentes críticos de sistemas magnéticos, submetidos a uma transição de fase de segunda ordem [150], e a explicação para como pequenas concentrações de impurezas magnéticas contribuem com as propriedades termodinâmicas dos metais [151] proporcionaram o desenvolvimento de vários modelos magnéticos teóricos, dentre eles o grupo de renormalização no espaço real proposto por Wilson [53, 54, 152].

Uma das suposições feitas dentro desses modelos magnéticos é que a suscetibilidade magnética dependeria da temperatura nas ligas magnéticas diluídas, o que ficou conhecido como modelo de Kondo [140]. O modelo de Kondo [140] está intimamente relacionado com o modelo de impurezas de Anderson [153], como mostrado pela transformação de Schrieffer–Wolff [154]

O Hamiltoniano proposto por Anderson [155, 153] pra descrever este tipo de sistema foi:

$$\hat{H}_A = \epsilon_d \sum_{\sigma} n_{\sigma}^d + U n_{\uparrow}^d n_{\downarrow}^d + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[ V_{\mathbf{k}, \sigma} \left( c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} d_{\mathbf{k}, \sigma} + d_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} \right) + \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} \right]. \quad (4.2)$$

Esta versão do modelo de impurezas de Anderson eq. 4.2 supõe que as impurezas não degeneradas têm energia  $\epsilon_d$ ,  $n_{\sigma}^d = d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}$  representa o operador número e  $d_{\sigma}^{\dagger}$  ( $d_{\sigma}$ ) corresponde ao operador criação (aniquilação). A interação de Coulomb  $U$  é local e está presente apenas nas impurezas metálicas, mas a hibridização  $V_{\mathbf{k}, \sigma}$  em geral permite espalhamento para todos os momentos. A função de hibridização

$$\Delta(w) = \pi \sum |V_{\mathbf{k}, d}|^2 \delta(w - \epsilon_{\mathbf{k}}), \quad (4.3)$$

que junto com a densidade de estados da banda de condução,  $\rho(w) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(w - \epsilon_{\mathbf{k}})$ , determinam o comportamento do sistema.

Supondo que há simetria no orbital,  $V_{\mathbf{k},d} = V_{k,d}$  e  $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_k$ , o que corresponderia a analisar o problema como um gás isotrópico de elétrons, que se assemelha, em alguns pontos, a um sólido metálico [156]. Se considerarmos apenas estados de ondas secundárias para os elétrons de condução, então  $c_{\mathbf{k},\sigma}$  pode ser substituído por  $c_{k,l=m=0,\sigma} \equiv c_{k,\sigma}$ .

Um modelo semelhante ao de Kondo é o modelo de troca s-d, cuja solução exata foi tratada por P.B. Wiegman [157]. O modelo de troca s-d pode ser definido como:

$$\hat{H}_k = J_k \mathbf{S}_d \cdot \mathbf{s}_0 + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (4.4)$$

com  $\mathbf{s}_0 = f_{0,\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma,\mu} f_{0,\mu}$  e estados de Wannier localizados gerados por  $f_{0,\sigma} = \sum_k c_{k,\sigma}$ , em que a impureza eletrônica é trocada por um spin- $\frac{1}{2}$  descrita pelo operador de spin  $\mathbf{S}_d$ .

Desta forma, fica fácil entender que o modelo de Kondo pode ser tomado como uma aproximação do modelo de Anderson, para o caso  $U \gg V$ , através da transformação de Schrieffer-Wolff [158] sendo  $\epsilon_d = -\frac{U}{2}$ , tem-se  $J_k = 8\frac{V^2}{U}$ .

Para converter os modelos, de Anderson e o de Kondo, para uma estrutura algébrica mais agradável para sua utilização e tratamento numérico, iremos mapeá-los em uma cadeia unidimensional utilizando a tridiagonalização de Lanczos [159].

Podemos definir o modelo de Anderson (com simetria orbital) pelos estados localizados de Wannier:

$$|0, \sigma\rangle \equiv f_{0,\sigma}^\dagger |\Psi_{vac}\rangle, \quad (4.5)$$

sendo  $|\Psi_{vac}\rangle$  denominado estado de vácuo. De tal forma que o operador  $f_{0,\sigma}$  nesta representação será

$$f_{0,\sigma} = \frac{1}{V} \sum_k V_{k,d} c_{k,d}, \quad (4.6)$$

com a normalização,  $V$ , sendo definida por

$$V = \left[ \sum_k |V_{k,d}|^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (4.7)$$

Sendo assim, podemos transformar a energia cinética de condução da banda:

$$H_c = \sum_k \epsilon_k c_{k,d}^\dagger c_{k,d}, \quad (4.8)$$

para uma nova base de operadores, reescrevendo-os na forma diagonal, pela construção de um conjunto de estados ortogonais criados pela aplicação de  $H_c$ :

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \frac{1}{\lambda_0} \left[ H_c |0\rangle - |0\rangle \langle 0| H_c |0\rangle \right] \\ |n+1\rangle &= \frac{1}{\lambda_n} \left[ H_c |n\rangle - |n\rangle \langle n| H_c |n\rangle - |n-1\rangle \langle n-1| H_c |n\rangle \right]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Nesta nova base, o Hamiltoniano 4.2 torna-se:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{Ac} &= \epsilon_d n_l^d + U n_{l,\uparrow}^d n_{l,\downarrow}^d + V \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left( f_{0,\sigma}^\dagger d_\sigma + d_\sigma^\dagger f_{0,\sigma} \right) \\ &+ \sum_{n=0,\sigma}^{\infty} \left[ \epsilon_n f_{n,\sigma}^\dagger f_{n,\sigma} + \lambda_n \left( f_{n,\sigma}^\dagger f_{n+1,\sigma} + f_{n+1,\sigma}^\dagger f_{n,\sigma} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde foi aplicada a notação da segunda quantização [160], os operadores  $f_{n,\uparrow}^\dagger$  criam um elétron no estado  $|n\rangle$ .

Os coeficientes de Lanczos,  $\lambda_n = \langle n+1|H_c|n\rangle$  e  $\epsilon_n = \langle n|H_c|n\rangle$ , dependente da dispersão  $\epsilon_k$  e a função de hibridização  $\Lambda(w)$  do modelo original. Em geral, esta pode ser determinada, no último caso numericamente, durante o procedimento de Lanczos [159]. Eles não necessariamente decaem com  $n$ , que é uma propriedade que é crucial para a convergência do método de grupo de renormalização de [161].

## 4.3 Grupo de Renormalização Clássico

### 4.3.1 Técnica de Escalonamento

Como explicado nas seções introdutórias deste capítulo, o grupo de renormalização no espaço real de Wilson introduziu, no modelo de Kondo, um procedimento iterativo de diagonalização numérica de Hamiltonianos de sistemas de elétrons correlacionados [144].

A técnica do grupo de renormalização pode ser vista como um mapeamento  $\mathcal{M}$  de um Hamiltoniano  $H(g)$  [162], que é especificado por um conjunto de parâmetros  $g = (g_1, g_2, \dots, g_N)$ , em um outro Hamiltoniano com a mesma estrutura, entretanto com novos conjuntos de parâmetros de acoplamento  $g' = (g'_1, g'_2, \dots, g'_N)$ , formalmente representados por:

$$\mathcal{M}[H(g)] = H(g'). \quad (4.11)$$

Este procedimento corresponde a um método recursivo, visto que o Hamiltoniano a ser diagonalizado em uma iteração tem seus elementos de matriz reescalados pelos elementos da etapa anterior. Utiliza-se os autovetores e autovalores de uma iteração para criar os autovetores e autovalores da próxima iteração e assim sucessivamente. Desta forma, é aplicada uma transformação de escala sobre o sistema, através de um fator de escala  $b$  predefinido.

Portanto, o fator de escala define a redução de graus de liberdade do sistema  $D$ -dimensional, de  $N$  para  $N'$ :  $b^d = \frac{N}{N'}$ . O objetivo é que a energia livre total permaneça a mesma, sendo necessário que a função de partição seja invariante sob a transformação:

$$\mathcal{Z}_{N'}(H(g')) = \mathcal{Z}_N(H(g)). \quad (4.12)$$

A energia livre por spin é uma grandeza intensiva, sendo assim

$$f(H(g')) = b^d f(H(g)). \quad (4.13)$$

As medidas dos comprimentos do sistema ficam diminuídas por um fator  $b$ :  $\vec{r}' = \frac{1}{b}\vec{r}$ .

### 4.3.2 Procedimento de Truncagem de Estados

No contexto do grupo de renormalização aplicado a redes de spin, ao se permitir que as variáveis de spin transformem-se de acordo com  $\vec{s}' = c^{-1}\vec{s}$ , também se permite que  $c$  seja uma constante diferente de  $b$ . De modo que a função de correlação entre dois spins se transformará, num procedimento de renormalização, de acordo com:

$$\Gamma(b^{-1}\vec{r}', H(g')) = \frac{1}{c^2}\Gamma(\vec{r}, H(g)). \quad (4.14)$$

A fim de ilustrar as técnicas do grupo renormalização de Wilson, agora voltaremos nossa atenção a análise do Hamiltoniano 4.2. Depois de aplicar o procedimento de tridimensionalização e a discretização logaritma sobre o Hamiltoniano 4.2 para um sistema finito de comprimento  $L$ , obtém-se:

$$\hat{H}'_k = D' \sum_{n=0, \sigma}^{L-1} \Lambda^{\frac{-n}{2}} \left( f_{n, \sigma}^\dagger f_{n+1, \sigma} + f_{n+1, \sigma}^\dagger f_{n, \sigma} \right) + 2J \sum_{\mu, \sigma} f_{0, \sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma, \mu} f_{0, \mu}, \quad (4.15)$$

onde

$$D' = D \frac{1 + \Lambda^{-1}}{2}, \quad (4.16)$$

sendo  $D$  a densidade de estados da banda de condução que é uma constante.

Devido ao decaimento exponencial dos acoplamentos, o sistema finito pode ser representado por

$$D_L \equiv \frac{D'}{\Lambda^{\frac{L-1}{2}}}. \quad (4.17)$$

A ideia é examinar o comportamento do fluxo de renormalização numericamente dos autovalores inferiores apropriadamente reescalados na sequência do processo iterativo de renormalização,  $H'_L, H'_{L+1}, \dots$ , sendo conveniente reescalar o Hamiltoniano diretamente, definindo  $H_L = \frac{H'_L}{D_L}$ .

Nós podemos relacionar  $H_L$  e  $H_{L+1}$  através da relação recursiva:

$$\hat{H}'_{L+1} = \Lambda^{\frac{1}{2}} H_L + \sum_{\sigma} \left( f_{L,\sigma}^{\dagger} f_{L+1,\sigma} \right) \equiv \mathcal{M}[H_L], \quad (4.18)$$

definindo a transformação do grupo de renormalização para o modelo de Kondo.

Em princípio, esta transformação é exata (os erros da discretização estão associados com  $\Lambda$ ). Contudo, para tratar cada subsequente  $H_L$  pela diagonalização numérica, o espaço de memória e o processamento computacional necessário ira crescer exponencialmente por causa dos graus de liberdade que serão ampliados por 4 a cada passo. O intuito deste método aproximativo é manter apenas os  $m$  menores autoestados de  $H_L$  a cada passo.

O procedimento do grupo de renormalização, na representação matricial, pode ser definido como:

1. Diagonalizar  $H_L$  numericamente e encontrar os  $m$  menores autovalores e autovetores correspondentes.
2. Usar o operador mudança de base  $\mathbf{O}_L$ , matriz cuja as linhas são os  $m$  autovetores foram obtidos no passo anterior, para reescrever todos os outros operadores que atuarão no sistema. Por exemplo,  $H'_L = \mathbf{O}_L^{\dagger} H_L \mathbf{O}_L$  é uma matriz diagonal de tamanho  $m$ . Entretanto, normalmente outro operador qualquer  $A'_L = \mathbf{O}_L^{\dagger} A_L \mathbf{O}_L$  não será diagonal por esta mudança de base.
3. Encontrar  $H_{L+1}$  a partir de  $H'_L$  usando a relação de recorrência 4.15, pela adição de um sítio e a construção de  $H'_{L+1}$  através da base reduzida.
4. Repetir os itens anteriores com  $H_{L+1} \rightarrow H_L$ , até que o tamanho final da rede seja alcançado.

Tal procedimento começa com um termo local puro  $H_0$  consistindo da impureza acoplada a um único sítio. Na prática, a relevância do procedimento acontece quando  $H_L$  é maior que  $m$ .

No passo (1) as propriedades de simetria devem ser aplicadas para reduzir o espaço de Hilbert do Hamiltoniano  $H_L$ , pela conservação de alguns números quânticos, como o número de elétrons  $N$  da banda de condução e a projeção do spin total  $S^z$ .



Aplicadas as simetrias, os elementos de matriz dos operadores que ligam os sítios  $L$  e  $L + 1$  como  $f_{L,\sigma}^\dagger f_{L+1,\sigma}$  podem ser construídos por um MPS [97]:  $|i, s_L\rangle \equiv |i\rangle|s_{L+1}\rangle$ , com o primeiro ket representando a base de  $H'_L$  e o segundo a base do sítio adicionado. A expressão do elemento de matriz  $H_{L+1}$  é

$$\begin{aligned} \langle i, s_L | H_{L+1} | i', s'_L \rangle &= \Lambda^{\frac{1}{2}} \langle i | i' \rangle \langle s_{L+1} | s'_{L+1} \rangle E_i^L \\ &+ (-1)^{N_{S_{L+1}}} \langle i | f_{L,\sigma}^\dagger | i' \rangle \langle s_{L+1} | f_{L+1,\sigma} | s'_{L+1} \rangle \\ &+ (-1)^{N_{S'_{L+1}}} \langle i | f_{L,\sigma} | i' \rangle \langle s_{L+1} | f_{L+1,\sigma}^\dagger | s'_{L+1} \rangle \end{aligned} \quad (4.19)$$

onde  $E_i^L$  são os autovalores de  $H_L$ ,  $i$  varia de 1 até  $m$ , e  $N_{S_L}$  é o número de elétrons no estado  $S_L$ .

Note que em um ponto particular no procedimento, o alcance dos autovalores de  $H'_L = D_L H_L$  que representam a precisão do espectro não será suficiente para descrevermos adequadamente o modelo.

Em particular, a precisão cai em escalas que são múltiplos de  $\alpha \times D_L$  que dependem do valor de  $\Lambda$  e do número de estados  $m$ . Tipicamente  $\alpha$  é da ordem de 10 quando  $m$  é 1000. Um limite mínimo de energia é mantido pela escala de energia  $D_L$ . Autovalores abaixo de  $D_L$  são aproximadamente mais precisos em passos subsequentes. Desta forma, os autovalores do Hamiltoniano reescalados  $E'_L$  poderão ser calculados com grande precisão no intervalo  $D_L \leq E'_L \leq \alpha D_L$ .

A fim de entender o comportamento de um sistema dentro do procedimento do grupo de renormalização, se faz importante analisar os pontos fixos das transformações de renormalização. Encontrar pontos fixos é encontrar pontos estacionários no fluxo de valores obtidos pela equação que governa a renormalização dessas constantes, como, por exemplo, a equação 4.18.

### 4.3.3 Fluxo de Renormalização

ATodo Hamiltoniano pode ser escrito na forma:

$$H(g') = \sum_{\{\alpha\}} \vec{h}_\alpha \cdot \vec{s}_\alpha, \quad (4.20)$$

onde  $\vec{s}_\alpha$  são os produtos de operadores com a devida simetria (no modelo de Heisenberg englobam, por exemplo, os operadores de spin) e  $\vec{h}_\alpha$  são chamados de campos conjugados [127].

Nesse tipo de representação, os campos se transformam sob a operação de renormalização da seguinte forma:

$$\vec{h}'_\alpha = \mathcal{M}[\vec{h}_\alpha], \quad (4.21)$$

e também possuem pontos fixos  $\vec{h}'_\alpha = \vec{h}_\alpha \equiv \vec{h}_\alpha^*$ . Podemos definir um deslocamento  $\Delta\vec{h}_\alpha$  em termos dos campos conjugados ao redor de algum ponto fixo,  $\Delta\vec{h}_\alpha = \vec{h}_\alpha - \vec{h}_\alpha^*$ , e assim expandir esses deslocamento em série de Taylor, resultando em:

$$\Delta\vec{h}'_\alpha = \mathbf{J}_\alpha(\vec{u}^*)\Delta\vec{h}_\alpha, \quad (4.22)$$

em que a matriz  $\mathbf{J}_\alpha$  deve ser calculada nos pontos críticos onde o sistema perde as correlações de escala. Sendo os autovalores,  $\lambda_i$ , e autovetores,  $\vec{v}_i$ , de  $\mathbf{J}_\alpha$  são determinantes para a avaliação das propriedades críticas do Hamiltoniano.

Os  $\lambda_i$  devem ter a forma:  $\lambda'_i = b^{c_i} \lambda_i$ , em razão de seu comportamento sob a mudança de escalas. Essa hipótese é chamada de hipótese de escala, ou de homogeneidade. Proporcionalmente, pode-se assumir que a energia livre seja uma função homogênea de suas variáveis [59].

Uma das diversas formas de implementar a transformação de escala consiste em fazer um traço parcial na função de partição do sistema. Nas proximidades do ponto crítico, o novo sistema com menos graus de liberdade deve ser equivalente ao original no limite termodinâmico. Este procedimento do traço parcial é conhecido como "dizimação" e é a base do método proposto por K. G. Wilson [152].

Dependendo do valor do expoente  $c_i$ , o sistema terá comportamentos distintos no espaço de fase:

- se o expoente  $c_i$  for positivo, os valores de  $g_i$  aumentam, fazendo o sistema se afastar cada vez mais no espaço de fase. Nessa situação,  $c_i$  é conhecido como expoente relevante;

- se o expoente  $c_i$  for negativo, os valores de  $g_i$  diminuem, fazendo o sistema se localizar num ponto fixo, não importando as condições iniciais. Nessa situação,  $c_i$  é conhecido como expoente irrelevante;
- se o expoente  $c_i$  for nulo,  $c_i$  recebe o nome de expoente marginal e foge do escopo de estudo, sendo descrita em [146].

O objetivo é encontrar os pontos fixos da transformação de escala:  $H(g') = H(g) \equiv H(g^*)$ , para o caso do expoente  $c_i$  negativo. Os pontos fixos são pontos de/para onde o sistema flui dependendo de suas condições iniciais.

Deve-se ter em mente que o Hamiltoniano  $H(g')$  é também função das coordenadas generalizadas. Portanto, a constância do Hamiltoniano ocasiona uma constância generalizadas e dentro da criticalidade todas as escalas são importantes. Para tanto, o comprimento de correlação deve permanecer constante sob a transformação  $\zeta(g') = \zeta(g) \equiv \zeta(g^*)$ .

Mas com a mudança de escala,  $\zeta' = (\frac{1}{b})\zeta$ , o que justifica o fato de  $\zeta \rightarrow \infty$  na criticalidade. Vale frisar que o caso  $\zeta = 0$  é o trivial e não é cabível ao problema [146].

A idéia básica do grupo de renormalização [144] surge da observação que o comprimento de correlação  $\zeta(T)$  se torna muito grande a medida que a temperatura se aproxima de  $T_c$ . Por tanto as estruturas observadas em diferentes escalas de distâncias devem ser as mesmas, sempre que esta escalas sejam muito menores que  $\zeta$ . Então, próximo dos pontos críticos é possível realizar as transformações de escala [162]. Não existe uma forma única de implementar uma transformação de escala, irá depender do sistema em particular.

Para o problema de Kondo, dois pontos fixos podem ser claramente identificados, um associado com o comportamento do modelo quando  $J = 0$  e outro quando  $J = \infty$ . O comportamento do sistema no ponto fixo é: para  $J = 0$ , a impureza é desacoplada da banda de condução e as energias de excitação são do tipo de bandas "tight-binding" não interagentes que se estendem de 0 até  $L$ . Para  $J = \infty$ , a impureza forma um uma ligação de alcance infinito com o sítio 0 na cadeia "tight-binding", efetivamente removendo-o do sistema.

As energias de excitação relativas ao estado fundamental são, desta forma, aquelas da cadeia se estendendo de 1 até  $L$ . O espectro de excitação de  $H_L(J = \infty)$  é o mesmo que o espectro de  $H_{L-1}(J = 0)$ . A natureza do espectro de  $H_L(J = 0)$  dependerá se  $L$  é par

ou ímpar. Os valores assintóticos das energias de excitação poderão ser diferentes para os casos ímpar e par do comprimento  $L$ .

Um ponto fixo  $K^*$  pode ter componentes que não correspondem às interações originais do sistema e, portanto, não necessariamente corresponderá ao ponto crítico  $K_c$ . O ponto crítico pode ser identificado como um ponto na superfície crítica que possua exatamente o conjunto de parâmetros do sistema original.

Como o comprimento de correlação de todos os pontos sobre a superfície crítica é infinito, o ponto  $K_c$  terá todas as propriedades do ponto crítico físico. No entanto, as propriedades críticas do sistema são determinadas pelo comportamento do fluxo de renormalização nas vizinhanças do ponto fixo  $K^*$  [163].

# GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DA MATRIZ DE DENSIDADE (DMRG)

## 5.1 Surgimento do DMRG

Alguns sistemas físicos podem ser descritos efetivamente através da combinação dos movimentos individuais de seus constituintes [148]. Contudo, em sistemas onde as interações entre os constituintes acarretam fortes efeitos de correlação entre eles, o mapeamento dos comportamentos isolados das partes levará a uma descrição errada do comportamento do sistema completo. Em alguns casos, essa obrigação de descrever o sistema como um todo torna inclusive o tratamento numérico exato inviável.

Para ilustrar esta impossibilidade, Poplavskii [164] afirmou:

”O cálculo quântico para uma molécula de Metano precisa de uma rede com 1042 pontos. Supondo que em cada ponto realizemos apenas 10 operações elementares, e que a computação é feita à temperatura extremamente baixa de  $T = 3 \times 10^{-3}K$ , poderia-se precisar nesse cálculo de toda a energia produzida na Terra durante o século passado.”

Outro comentário célebre, sobre o tema em questão, foi feito por Philip W. Anderson [165]:

”O comportamento de grandes e complexos agregados de partículas elementares não pode ser entendido em termos de uma simples extrapolação das propriedades de algumas poucas partículas. Ao invés disso, a cada nível de complexidade, propriedades completamente novas aparecem e o entendimento desses novos comportamentos requer pesquisa que considero de natureza tão fundamental quanto qualquer outra.”

Acerca da complexidade na descrição de sistemas reais através de modelos teóricos, Philip W. Anderson comenta [151]:

”Um modelo teórico precisa, simultaneamente, ser suficientemente simples para ser solúvel (ou pelo menos compreensível) e suficientemente complexo para ser interessante, na medida em que a sua complexidade contenha as características essenciais que simulem o comportamento observado no mundo real, preferencialmente algum aspecto que ainda não tenha sido explicado.”

Quando se trabalha com problemas de partículas quânticas interagentes em redes, um dos principais obstáculos para a solução do problema está relacionado com o tamanho do espaço de Hilbert,  $\mathcal{H}$ , [166, 167] que irá representar o modelo [5].

Um espaço vetorial,  $\mathcal{H}'$ , sobre o corpo dos complexos e dotado de um produto escalar  $u, v \in \mathcal{H}' \rightarrow \langle u, v \rangle \in \mathbb{C}$  é dito ser um espaço de Hilbert se for completo em relação à métrica  $d$  definida por seu produto escalar:

$$d(u, v) = \|u - v\| = \sqrt{\langle u - v, u - v \rangle}. \quad (5.1)$$

Espaços de Hilbert desempenham um papel fundamental em toda a Mecânica Quântica e em várias áreas da Matemática. Historicamente, sua importância na Mecânica Quântica foi apontada por diversos autores [160], mas foi especialmente von Neumann quem mais claramente destacou sua relevância para a própria interpretação probabilística, o que ficou conhecido como interpretação de Copenhague[94].

Tecnicamente, determinar o estado quântico de um sistema é conhecer, para qualquer observável do sistema, as probabilidades de todos os possíveis resultados de suas medições. De ponto de vista numérico, as possibilidades de se investigar um sistema quântico estão em discretizar uma equação diferencial ou simular computacionalmente o modelo diretamente sobre a rede, descrevendo as propriedades dos sítios locais e especificando a topologia da rede: suas dimensões, tipos de interação entre os sítios e as condições de contorno periódicas.

Através das técnicas do Grupo de Renormalização [168] se faz possível contornar essa problemática. A idéia é começar com um sistema para o qual pode-se encontrar a solução exata, o tamanho do sistema é então aumentado, porém sem aumentar o espaço de Hilbert do sistema, até que se chegue ao tamanho desejado.

Levando em consideração a ordem cronológica do desenvolvimento das técnicas de grupo de renormalização, elas foram introduzidas pela primeira vez por Stückelberg e Petermann [169] em 1953. No entanto, suas consequências para a eletrodinâmica quântica só foram aplicadas um ano depois por Gell-Mann e Low [170], enquanto analisavam a estrutura analítica dessa teoria que exibía inúmeras divergências introduzidas por flutuações quânticas na teoria de perturbação. Mais tarde, em 1970, esses conceitos foram estendidos e generalizados por Callan (1970) [171] e Symanzik [172] e formam hoje o chamado grupo de renormalização de teoria de campos.

Ainda na década de 70, houve uma reformulação do que se conhecia como técnicas de grupo de renormalização (essencialmente equivalente ao método do GR de teoria de campos para modelos renormalizáveis) proposta por Wilson [144, 53], o que ficou conhecido como grupo de renormalização do espaço real. O objetivo era de calcular os expoentes anômalos das chamadas transições de fase clássicas de segunda ordem, que se manifestam, tipicamente, em física da matéria condensada.

A teoria do Grupo de renormalização no espaço real também gerou o ápice evolutivo da compreensão dos fenômenos de transição de fase em sistemas físicos de muitos corpos. Nas décadas de 1960 e 1970, através das contribuições fundamentais de uma série de físicos, entre eles B. Widom [173], M. Fisher [174], L. Kadanoff [146] e K. G. Wilson [144, 175, 144], possibilitaram o desenvolvimento e amadurecimento das idéias e aplicações do Grupo de Renormalização nas mais diversas situações.

O crescimento do sistema, na técnica de renormalização, sem aumentar o espaço de Hilbert pode ser descrito, de forma minimalista, em duas etapas:

1. O tamanho do sistema é aumentado, e conseqüentemente o espaço de Hilbert também cresce.
2. O espaço de Hilbert é truncado para seu tamanho original, mantendo seu tamanho constante.

O critério de truncagem escolhido e como é feito o aumento do sistema são os pilares que diferenciam todas as técnicas de Renormalização entre si. Na versão do algoritmo de Wilson [144] começa-se com um sistema pequeno, que é unido, posteriormente, a um sistema igual, dobrando seu tamanho. O Hamiltoniano desse novo bloco é obtido e diagonalizado exatamente, seus autovetores serão utilizados como base. O espaço será truncado para o espaço gerado pelos  $m$  autovetores correspondentes às menores energias.

Quando trunca-se a base, são selecionados apenas alguns estados de maior peso e despreza-se todo o restante, podendo acarretar em uma negligência de vários aspectos importantes da física envolvida. Esse problema, contudo, é dependente da base escolhida para representar os estados. Se escolhermos uma base de maneira adequada podemos fazer com que haja uma maior concentração dos pesos estatísticos e diminua, assim, a quantidade de informação perdida no processo de truncagem.

Esse procedimento mostrou-se satisfatoriamente eficiente para o modelo de Kondo [140]. Porém outros modelos fortemente correlacionados, como o de Heisenberg [11], não produzem bons resultados. Desta forma, o fracasso (ou sucesso) do procedimento de renormalização surge na escolha dos autoestados a serem mantidos como base. Como o bloco não está previamente conectado com o resto do sistema, esses autoestados não têm as características apropriadas nas regiões de fronteira (na ponta do bloco em que se conecta ao outro).

No inverno de 1992, a revista *Physical Review Letters* publicou um artigo intitulado "Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Groups" de Steven R. White [176] indicando esse problema e tentando resolvê-lo combinando autoestados de diferentes blocos e sob variadas condições de contorno. Este artigo introduziu um novo algoritmo baseado nas ideias do Grupo de renormalização numérico de Wilson, o grupo de renormalização da matriz de densidade quântica (DMRG, do inglês), para se calcular os estados alvos (de baixa energia) e os observáveis do modelo antiferromagnético unidimensional de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$  e spin-1.

Seis anos após a publicação do artigo de White [177], descobriu-se que a técnica do DMRG está intimamente ligada a uma classe especial de estados quânticos, conhecidos como estados do produto de matrizes (MPS) [30]. Isto ocasionou o surgimento de várias extensões e propostas para ampliação do alcance do DMRG, entre elas o algoritmo ALPS [88].

## 5.2 Simetrias e a Redução do Espaço de Hilbert

O conceito de simetria vem sendo construído pela humanidade desde tempos longínquos e tem sido abordado de um ponto de vista filosófico, artístico e matemático. A análise das propriedades de simetria de um sistema físico nos dá, de antemão, informações preciosas



sobre o mesmo, como a forma de suas soluções (Teorema de Bloch [178]), redução de graus de liberdade, etc...

Dentro desta temática, pode-se examinar o função das simetrias dentro do formalismo de sistemas quânticos de spin e sua relação com quantidades físicas conservadas, sob o ponto de vista de generalizações do teorema de Noether [179]: a invariância de Hamiltoniano com respeito a qualquer transformação do sistema implica na existência de um certo valor conservável relativo a esta transformação (ou grupo das transformações) [180].

Historicamente, a primeira proposta para agrupar as leis de conservação e simetrias foi investigada primeiramente por Schütz [181] para o caso de simetria translacional. Uma construção mais generalista foi proposta pelo teorema de Noether [179] que introduziu uma ligação entre as leis de conservação e as transformações do grupo de Galilei [182].

O teorema de Noether (1918) [179] foi obtido pela matemática e física, Emi Noether, sendo primeiro aplicado em teoria algébrica dos grupos e depois à mecânica clássica. Sua generalização para mecânica quântica foi feita pelo E. Wigner e J. von Neumann [183, 184].

Na mecânica clássica, nós usualmente consideramos a formulação Lagrangeana definida em termos do Lagrangeano  $L$  [148], diferença entre a energia cinética e a energia potencial de interação, para definirmos as simetrias do sistema.

Se, por exemplo, o Lagrangiano do sistema permanecer inalterado por um deslocamento da partícula em um sentido,  $L(x, v_x, t) = L(x + \delta x, v_x, t)$ , então a componente do momento linear naquele sentido,  $p_x$ , é uma quantidade conservada. Teremos uma simetria (de translação) e uma quantidade física foi conservada ( $p_x$ ), como prevê o teorema de Noether. Pode-se classificar as simetrias como contínuas (rotação, translação, ...) e discretas (paridade, translação de rede, reversão temporal, ...).

Na mecânica quântica, chama-se operadores unitários infinitesimais operadores da forma  $\hat{X}_i = 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{P}_i$ , sendo  $\hat{P}_i$  um operador Hermitiano ( $\hat{P}_i^\dagger = \hat{P}_i$ ). De tal forma, podemos associar um operador unitário  $\hat{X}_i$  para uma transformação que conserve a probabilidade.

Define-se simetria de um sistema com Hamiltoniano  $H$  uma transformação unitária que torne o Hamiltoniano invariante. Seja,  $\hat{X}_i = e^{\frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{P}_i}$  uma simetria. Então,

$$\hat{X}_i^\dagger H \hat{X}_i = H, \quad (5.2)$$

o que é equivalente a

$$\left[ \hat{P}_i, H \right] = 0. \quad (5.3)$$

Na representação de Heisenberg, a correspondente equação de movimento para  $\hat{P}_i$  é:

$$\frac{d\hat{P}_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[ \hat{P}_i, H \right] \rightarrow \frac{d\hat{P}_i}{dt} = 0. \quad (5.4)$$

Desta forma,  $\hat{P}_i$  não depende do tempo e isto representa uma conservação do operador  $\hat{P}_i$ , frente a simetrias de translação do sistema. Portanto, podemos inferir:

- se  $H$  é invariante sobre translação, então o momento linear é uma constante de movimento;
- se  $H$  é invariante sobre rotação, então o momento angular é uma constante de movimento.

A fim de minimizar as dimensões do espaço de Hilbert do sistema, que agiliza e, em alguns casos, é a única forma de tornar possível o tratamento numérico exato, é essencial explorar as simetrias do sistema, como mencionado detalhadamente em [185].

Dado um grupo de simetria  $S$  com geradores  $s_p$ , se  $[H, s_p] = 0$ , o espaço de Hilbert,  $\mathcal{H}$ , pode ser particionado em setores, correspondendo a uma representação irredutível do grupo de simetria, então o Hamiltoniano  $H$  torna-se um bloco diagonalizável nessa situação. A solução do problema de autovalores para cada bloco leva a um parte do espectro associada a um número quântico específico que é conservado.

Isto possibilita explorar simetrias e suas relações com as quantidades conservadas (conservação do número de partículas, conservação da projeção  $z$  do spins, conservação do valor quadrado do spin total, ...) dentro de modelo de spins em redes, ou seja:

$$\left[ H, (\vec{S})^2 \right] = \left[ H, S^z \right] = \left[ H, N \right] = 0, \quad (5.5)$$

e estes operadores também comutam entre si,

$$\left[ S^z, (\vec{S})^2 \right] = \left[ N, S^z \right] = \left[ (\vec{S})^2, N \right] = 0. \quad (5.6)$$

Então, os autovalores de  $H$ ,  $(\vec{S})^2$ ,  $S^z$  e  $N$  são simultaneamente bons números quânticos, pois representam quantidades conservadas no sistema. Durante o tratamento numérico de um dado modelo é possível considerar autovalores que simultaneamente diagonalizam  $H$  e todos os outros operadores associados com as simetrias.

Isto é feito pela escolha de uma representação de operadores simétricos que são sempre diagonais, selecionando um subespaço ou um setor do espaço de Hilbert contendo valores particulares destes operadores, e diagonalizar  $H$  neste setor particular, como exemplifica a tabela 5.1 que mostra a redução da dimensão espaço de Hilbert para o modelo de Heisenberg numa rede quadrada com 40 sítios para  $S = \frac{1}{2}$ :

Tabela 5.1: A redução da dimensão do espaço de Hilbert para o modelo de Heisenberg numa rede quadrada com 40 sítios para  $S = \frac{1}{2}$ .

Simetrias aplicadas	Dimensão do Espaço de Hilbert do sistema
Espaço Hilbert completo	dim = $2^{40}$
Restringindo $S_z = 0$	dim = $138 \times 10^9$
A inversão dos spins	dim = $69 \times 10^9$
Todas as 40 translações	dim = $1.7 \times 10^9$
Todas as 4 rotações	dim = 430, 909, 650

A tabela 5.1 mostra diretamente como as simetrias podem reduzir a dimensão do espaço de Hilbert do Hamiltoniano do modelo de Heisenberg a ser diagonalizado. Neste caso, a dimensão do setor a ser diagonalizado é reduzida por um fator maior que 2500.

### 5.3 Processo de Truncagem em Blocos

Considere uma rede semi-infinita com  $N$  sítios, onde cada sítio tem  $d$  graus de liberdade locais. Se agrupados  $k$  sítios num bloco, o estado do bloco terá  $d^k$  coeficientes. Normalmente essa construção resulta em espaço de Hilbert exponencialmente grandes e insolúveis pelas limitações computacionais, mesmo após o processo de redução do Hilbert geral, utilizando as simetrias do modelo. Para contornar essa problemática, surgiram diversas propostas para a construção iterativa dos blocos aliadas à técnica da truncagem de estados [176, 177, 144, 54]

De modo geral, começa-se com um bloco contendo apenas um único sítio. Então irão sendo adicionados, sequencialmente, cada um dos sítios da rede. Posteriormente, inicia-se o processo de redução de graus de liberdade, no qual descarta-se alguns autoestados uti-

lizando um critério predefinido, por exemplo, mantém-se apenas os primeiros autovetores que estão relacionados aos  $m$  maiores autovalores da matriz de densidade reduzida do bloco, no caso do DMRG [186, 176], para evitar o crescimento exponencial inevitável do processo exato  $d \rightarrow d^2 \rightarrow d^3 \rightarrow \dots$

Do ponto de vista operacional, será mantido um número  $m$  de estados fixos para que o sistema consiga ser solúvel (segundo um critério predefinido pelo método de renormalização), com isso contornam-se as possíveis limitações da capacidade de processamento, memória de armazenamento e redução do tempo computacional. Essa escolha de  $m$  estados é o que se define por truncagem do bloco.

A criação da base de um bloco de comprimento  $l$  pela adição de dois subsistemas: um com a base  $\{|a_{l-1}\rangle\}$  que representará um sub-bloco de comprimento  $l-1$  e outro com uma base  $\{|\sigma_l\rangle\}$ , que representa a adição dos sítios ou outro sub-bloco, pode ser representada como:

$$|a_{l-1}\rangle \otimes |\sigma_l\rangle \rightarrow |a'_l\rangle. \quad (5.7)$$

Pode-se aplicar uma mudança de base dos operadores e autovetores do sistema dentro de uma base truncada, formada por  $m$  maiores autovetores,  $|a_l\rangle = \mu_{a'}^a |a'_l\rangle$ . De fato, os  $m$  estados formarão uma base incompleta do bloco total de tamanho  $l$ :

$$|a_l\rangle = \sum_{a_{l-1}, \sigma_l} \langle a_{l-1}, \sigma_l | |a_l\rangle |a_{l-1}, \sigma_l\rangle \equiv \sum_{a_{l-1}, \sigma_l} M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l} |a_{l-1}, \sigma_l\rangle. \quad (5.8)$$

Para cada estado do sítio adicionado  $\sigma_l$ , a matriz  $M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l}$  mapeará o sistema do bloco aumentado  $l$  através da base  $a_{l-1}$  e do sub-bloco  $\sigma_l$  descrevendo um novo bloco com a nova base  $a_l$ , a base truncada para o bloco aumentado com tamanho  $l$ ; Esse procedimento continuará com esta base mantendo sempre o mesmo tamanho. A função de onda será representada por uma soma desses produtos, conhecida como estados de produto de matrizes (MPS) [89]:

$$|\Psi_{MPS}\rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \mathbf{Tr}\{M^{\sigma_1} M^{\sigma_2} \dots M^{\sigma_l}\} |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_l\rangle, \quad (5.9)$$

onde os  $M^{\sigma_i}$  são matrizes de dimensão  $m \times m$ , exceto por  $M^{\sigma_1}$  e  $M^{\sigma_l}$  que são vetores de dimensão  $m$ .

Considerando que o traço é feito sobre o conjunto de sítios adicionados, a renormalização será dada por  $\sum_{\{\sigma_i\}} M^{\sigma_i} (M^{\sigma_i})^\dagger = 1$ , e esse tipo de estrutura é um caso particular de um MPS [187]. Um estado  $|\Psi_{MPS}$  translacionalmente invariante é aquele cujo todos os  $M^{\sigma_i}$  são iguais, como o caso do estado saturado ferromagnético para modelos de spin. Este protocolo leva a algumas considerações:

- Qualquer esquema de renormalização pode ser caracterizado por um esquema de crescimento iterativo em blocos seguido de um processo de redução de estados [168];
- Métodos de redução e truncagem de blocos levam a estados do tipo MPS;
- A teoria do MPS liga o grupo de renormalização de Wilson [53, 144] ao DMRG [187]. Apesar do método GR de Wilson falhar na descrição de sistemas quânticos fortemente correlacionados.

Apesar da liberdade de escolha na decisão de qual base o MPS será escrito, deve-se priorizar que  $\{|a_{l-1}\rangle\}$  e  $\{|a_l\rangle\}$ , que constituem os blocos, formem uma base ortonormal:

$$\begin{aligned} \delta_{a'_l, a_l} &= \langle a'_l | a_l \rangle = \sum_{\sigma'_l, \sigma_l, a_{l-1}, a'_{l-1}} (M_{a'_{l-1}, a'_l}^{\sigma'_l})^* M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l} \langle a'_{l-1} \sigma'_l | a_{l-1} \sigma_l \rangle \\ &= \sum_{\sigma_l, a_{l-1}} (M_{a_{l-1}, a'_l}^{\sigma_l})^* M_{a_{l-1}, a'_l}^{\sigma_l} = \sum_{\sigma_l} (M^{\sigma_l \dagger} M^{\sigma_l})_{a'_l, a_l} \\ \text{ou } I &= \sum_{\sigma_l} M^{\sigma_l \dagger} M^{\sigma_l} \equiv \sum_{\sigma_l} A^{\sigma_l \dagger} A^{\sigma_l}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

As matrizes que obedecem essa relação, conhecida como "normalizada à esquerda", serão descritas por  $A$ , exatamente a mesma propriedade que segue a decomposição geral de estados,  $U^\dagger U = I$  [168].

Então, o processo de criação normalizada à esquerda segue da seguinte forma: constroi-se o novo bloco à esquerda, adicionam-se os spins que estão à direita e realiza-se uma

decomposição em valores singulares (SVD) [188] no estado geral de cada processo criado. No processo "normalizada à direita", as matrizes são descritas por  $B$ , constroi-se o novo bloco à direita, adiciona-se os spins que estão à esquerda e realiza-se o SVD no estado geral.

Contudo como podemos comprimir um MPS nesse processo iterativo, perdendo o mínimo de informação possível e evitando o crescimento exponencial do espaço de Hilbert? Essa é a pergunta central por trás de qualquer um dos métodos de renormalização.

Para responder a essa pergunta, assume-se um estado qualquer  $|\Psi\rangle$ , constituído de operadores  $A$  (normalizados à esquerda) e  $B$  (normalizados à direita), criado na representação MPS:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma} A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_l} M^{\sigma_{l+1}} B^{\sigma_{l+2}} \dots B^{\sigma_L} |\sigma_1 \dots \sigma_L\rangle. \quad (5.11)$$

Com esse estado em mãos, deseja-se comprimir o operador  $M^{\sigma_{l+1}}$  de forma a reduzir ao mínimo a perda de precisão na descrição de  $|\Psi\rangle$ . Para este fim, pode-se criar uma pilha com as  $d$  matrizes colunas de  $M^{\sigma_{l+1}}$  em uma única matriz:

$$M_{a_l, \sigma_{l+1}, a_{l+1}} = M_{a_l, a_{l+1}}^{\sigma_{l+1}} \quad (5.12)$$

e realizar um SVD na matriz,  $M_{a_l, \sigma_{l+1}, a_{l+1}}$ , criada. Sendo assim:

$$M_{a_l, \sigma_{l+1}, a_{l+1}} = USV^\dagger \quad (5.13)$$

Se absorvemos  $U$  em  $A^{\sigma_l}$ , ou seja  $A^{\sigma_l} \leftarrow A^{\sigma_l} U$ , isso irá corresponder a uma transformação da base ortonormalizada reduzida no bloco A. Gerando uma nova base  $|a_l\rangle_A$  formada pelos sítios de 1 a  $l$ :

$$|a_l\rangle_A = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_l} (A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_l})_{1, a_l} |\sigma_1 \dots \sigma_l\rangle. \quad (5.14)$$

Similarmente,

$$V_{a_l, \sigma_{l+1}, a_{l+1}}^\dagger = B_{a_l, a_{l+1}}^{\sigma_{l+1}}, \quad (5.15)$$

para termos uma nova base ortonormal formada pelos sítios do bloco de  $l + 1$  até  $L$  (ao invés de  $l + 2$  até  $L$ ), lembrando que  $B^{\sigma_{l+1}}$  são normalizadas à direita. Desta forma, temos uma base:

$$|a_l\rangle_B = \sum_{\sigma_{l+1}\dots\sigma_L} (B^{\sigma_{l+1}}B^{\sigma_{l+2}}\dots B^{\sigma_L})_{a_l,1}|\sigma_{l+1}\dots\sigma_L\rangle, \quad (5.16)$$

que geralmente não é normalizada. Isto está relacionado à imposição da normalização à esquerda das matrizes  $A$ . Para demonstramos essa afirmação, vamos realizar um produto interno utilizando a base correspondente à  $A$ :

$$\begin{aligned} \langle a'_l || a_l \rangle_A &= \sum_{\sigma_1\dots\sigma_l} (A^{\sigma_1}\dots A^{\sigma_l})_{1,a'_l}^* (A^{\sigma_1}\dots A^{\sigma_l})_{1,a_l} \\ &= \sum_{\sigma_1\dots\sigma_l} (A^{\sigma_1}\dots A^{\sigma_l})_{1,a'_l}^\dagger (A^{\sigma_1}\dots A^{\sigma_l})_{1,a_l} \\ &= \sum_{\sigma_1\dots\sigma_l} (A^{\sigma_l\dagger}\dots A^{\sigma_1\dagger}A^{\sigma_1}\dots A^{\sigma_l})_{a'_l,a_l} \\ &= \delta_{a'_l,a_l}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

De modo análogo, para a base correspondente a  $B$ :

$$\begin{aligned} \langle a'_l || a_l \rangle_B &= \sum_{\sigma_{l+1}\dots\sigma_L} (A^{\sigma_{l+1}}\dots A^{\sigma_L})_{a'_l,1}^* (A^{\sigma_{l+1}}\dots A^{\sigma_L})_{a_l,1} \\ &= \sum_{\sigma_{l+1}\dots\sigma_L} (A^{\sigma_L\dagger}\dots A^{\sigma_{l+1}\dagger})_{1,a'_l} (A^{\sigma_{l+1}}\dots A^{\sigma_L})_{a_l,1} \\ &= \sum_{\sigma_{l+1}\dots\sigma_L} (A^{\sigma_{l+1}}\dots A^{\sigma_L}A^{\sigma_L\dagger}\dots A^{\sigma_{l+1}\dagger})_{a'_l,a_l}, \end{aligned} \quad (5.18)$$

que não pode ser simplificado pois  $\sum_{\sigma} A^{\sigma}A^{\sigma\dagger} \neq I$ .

Agora que discutimos quem são as bases normalizadas à esquerda e à direita,  $|a_l\rangle_A$  e  $|a_l\rangle_B$ , podemos identificar na decomposição SVD de  $M^{\sigma_{l+1}}$ , eq. 5.13,  $s_{a_l} = S_{a_l,a_l}$ , então  $|\Psi\rangle$  torna-se:

$$|\Psi\rangle = \sum_{a_l} s_{a_l} |a_l\rangle_A |a_l\rangle_B, \quad (5.19)$$

que é exatamente a decomposição de Schmidt de  $|\Psi\rangle$  [89].

Consequentemente a representação MPS, representada pela eq. 5.11, pode se tornar uma decomposição de Schmidt, representada pela eq. 5.19, e vice-versa.

Entretanto a decomposição de Schmidt é de extrema importância quando queremos realizar a técnica do DMRG, pois permite descrever uma correta estratégia de compressão utilizando os  $s_{a_i}$ , que são proporcionais aos pesos estatísticos do operador matriz de densidade reduzida. A redução de estados, otimizada para o sistema quântico, é dada por manter-se os pares de estados de Schmidt que possuem os maiores coeficientes de Schmidt [89].

Pode-se organizar a matriz  $A^{\sigma_l}$  assumindo a ordem decrescente dos valores singulares, variando as dimensões da coluna de 1 até o valor de corte  $m$ , o mesmo processo para as linhas de  $B^{l+1}$ , e ambas as dimensões de  $S$ .

Após a truncagem, multiplica-se  $S$  a esquerda,  $M^{\sigma_l} \leftarrow A^{\sigma_l} S$ . As matrizes no sítio  $l$  irão perder suas propriedades de normalização e o estado nessa situação será:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma} A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_{l-1}} M^{\sigma_l} B^{\sigma_{l+1}} \dots B^{\sigma_L} |\sigma_1 \dots \sigma_L\rangle. \quad (5.20)$$

Comparando com nosso estado inicial, a ligação entre os estados normalizados à esquerda e à direita foi movida um sítio à esquerda. Esse procedimento pode ser continuado agora no sítio à esquerda e, posteriormente, nos demais sítios da rede.

A qualidade da aproximação pela truncagem de estados depende de quão rápido os valores singulares  $s_{\alpha}$  da decomposição de Schmidt (ou os pesos estatísticos da matriz densidade reduzida) decaem com  $a$ : se eles decaírem rapidamente, o limite da truncagem será negligenciável.

Não é natural saber de antemão o espectro da matriz densidade reduzida. O emaranhamento de formação tem um papel importante nesse processo que contém similar mas muito menos informação: um estado no qual os  $s_{a_i}$  decaem rapidamente têm menos emaranhamento que um estado que tem um decaimento lento de  $s_{a_i}$  [87].

Portanto, a viabilidade de representação de um estado por um MPS está intimamente ligada às propriedades de emaranhamento dos estados bases, sendo MPS iniciado comumente por uma representação de baixo emaranhamento. Normalmente, é utilizado um



bloco formado por um único spin.

É importante frisar que a realização deste procedimento de compressão dos estados dos blocos não pode ser absolutamente otimizada. Enquanto se otimiza em um passo, comumente, as demais compressões dos sítios dependem dos resultados de outras compressões de sítios que os antecederam. Então, há uma informação assimétrica que é repassada, a cada passo, que usualmente não é muito importante porque a quantidade de compressão num único sítio é pequena, embora não possa ser ignorada. Para contornar essa problemática, uma técnica variacional foi proposta em [95].

## 5.4 Técnica do Grupo de Renormalização da Matriz Densidade

O coração da formulação da técnica do DMRG [176] consistiu numa nova abordagem para processo de truncagem do sistema, com o auxílio da matriz densidade reduzida, e uma nova estratégia de crescimento do sistema. No grupo de renormalização de Wilson, o estado de um sítio é adicionado ao processo a cada passo. No DMRG, há uma maior liberdade de escolha de como o sub-blocos serão formados.

A formação dos sub-blocos irá recair em duas situações, dependendo de como se deseja formar o superbloco durante as iterações:

- **Algoritmo da cadeia infinita:** o crescimento do bloco é aplicado de maneira semelhante ao do NRG (entretanto no DMRG ao superbloco são acrescentados 2 sítios a cada passo);
- **Algoritmo da cadeia finita:** no sistema finito, os subblocos são escolhidos de maneira que o tamanho do superbloco seja mantido constante, permitindo um iterativo melhoramento da função de onda total do sistema.

### 5.4.1 Algoritmo da Cadeia Infinita

Dentro do procedimento da cadeia infinita, o algoritmo pode ser usado para encontrar os pontos fixos do sistema infinito, ou, como irá se observar, para construir uma aproximação inicial para o sistema finito.

Considera-se uma aproximação inicial para o problema, pois o algoritmo do tamanho infinito não garante a convergência variacional com o número  $m$  de estados fixos, sendo  $m$  bem menor que o número total de estados para a maioria dos sistemas finitos [161].

O procedimento do algoritmo da cadeia infinita para o cálculo do estado fundamental de um sistema unidimensional, supondo a simetria de reflexão dos blocos, é descrito por:

1. escolher uma quantidade  $x$  de spins para formar um **bloco**, cujo Hamiltoniano é  $H_B$ ;
2. adicionar a esse bloco um único spin, definindo um **bloco aumentado** de tamanho  $x + 1$ ;
3. formar o **superbloco** (de tamanho  $2(x+1)$ ) adicionando um novo bloco aumentado, com a mesma estrutura do primeiro bloco aumentado, à direita do bloco aumentado criado no passo anterior;
4. diagonalizar o Hamiltoniano do superbloco  $H_l^{super}$  numericamente, obtendo apenas o autovalor e o autovetor  $\Psi$  associado ao estado alvo desejado, que pode (ou não) ser o estado fundamental;
5. construir a matriz densidade reduzida  $\rho_{ii'}$ ,  $\rho_{ii'} = \sum_j \Psi_{ij}^* \Psi_{i'j}$ , sendo  $|i\rangle$  a base do bloco de tamanho  $l + 1$ ,  $|j\rangle$  a base do restante do superbloco e  $\Psi_{ij} = \langle i | \langle j | \Psi \rangle$  as projeções do estado alvo escolhido no passo anterior;
6. diagonalizar  $\rho_{ii'}$  e manter apenas os  $m$  maiores autovalores;
7. reescalonar todos os operadores através de um novo operador de mudança de base  $O_{l+1}$ . O operador mudança de base é uma matriz, cujas linhas são os  $m$  autovetores obtidos no passo anterior. O reescalonamento é obtido aplicando-se, por exemplo,  $H^{super} = O_{l+1}^\dagger H^{super} O_{l+1}$ ;
8. verificar se a diferença na energia  $\Delta E$ , entre dois passos sucessivos, varia dentro de um intervalo  $I_E$  preestabelecido (ou quando atingimos o tamanho desejado para o sistema):
  - (a) se  $\Delta E > I_E$ : substituir o Hamiltoniano do bloco pelo Hamiltoniano do superbloco,  $H_l^{super} \rightarrow H_B$ , e repetir os passos anteriores, começando pelo passo 2;

(b) **caso não:** parar o procedimento.

Entranto o método do DMRG da cadeia infinita, quando aplicado a uma cadeia finita, possui uma fragilidade: a função de onda do estado alvo a cada passo é diferente, pois o tamanho dos blocos será diferente, o que acarreta uma fraca convergência ou uma ausência de convergência com  $m$  [176]. Isso surge devido à negligência de alguns estados com alguma incomensurabilidade com a rede ou emaranhamentos locais não contabilizados, como por exemplo, estados excitados de spin caracterizados por estados quânticos exóticos [88].

Desta forma, surge a necessidade de um novo algoritmo que possa ser tratado a cada passo: ao invés de convergência para um ponto fixo (como no caso do sistema infinito) com as iterações, haverá uma convergência variacional da função de onda ou do conjunto de funções de onda para um particular sistema finito. Este novo algoritmo ficou conhecido como DMRG de **cadeia finita**.

## 5.4.2 Algoritmo da Cadeia Finita

No DMRG da **cadeia finita** o crescimento, obtido pelo algoritmo da **cadeia infinita**, é interrompido quando o superbloco atinge o tamanho desejado. A fim de eliminar erros inerentes ao crescimento pelo algoritmo da **cadeia infinita**, após o superbloco atingir o tamanho máximo implementamos os ciclos, chamados sweeps.

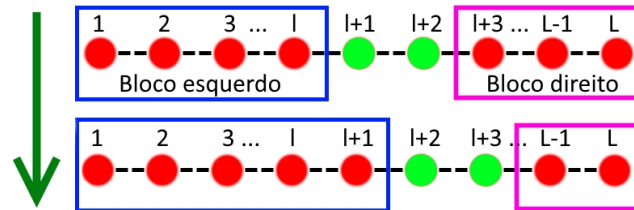
**Sweep** é um ciclo completo de crescimento do bloco da esquerda às custas da diminuição do da direita, seguido do aumento bloco da direita graças a diminuição do da esquerda, como visto na figura 5.1, ou seja, é um procedimento de ida e vinda da operação "crescimento-decrescimento" dos blocos aumentados.

Para obter o estado fundamental de uma cadeia linear de tamanho  $L$ , após o crescimento, aumentamos o tamanho do bloco esquerdo até que o tamanho seja  $L-3$ , enquanto o bloco direito diminui até que este possua apenas um sítio. Em seguida, revertemos a situação, e o bloco da direita crescerá até possuir o tamanho  $L-3$  enquanto o da esquerda irá diminuindo a cada iteração.

O número de sweeps necessários depende do tamanho da cadeia, do modelo e da "quantidade de estados mantidos"  $m$  (maxstates number, do inglês), ou seja, deve ser feita uma análise de "escala do tamanho finito" (finite-size scaling, do inglês) para cada modelo escolhidos usando a energia por spin em função do número de sweeps como parâmetro,

para se decidir o número ideal de sweeps a serem escolhidos [189].

Figura 5.1: Aumento (Diminuição) do bloco esquerdo (direito) durante um dos passos da movimentação "da esquerda para direita" dentro do sweep do DMRG do sistema finito de tamanho  $L$



Fonte: Autor, 2017.

Podemos sintetizar o algoritmo do DMRG de tamanho finito da seguinte forma:

1. aplicar o DMRG da **cadeia infinita** ao sistema, até o superbloco alcançar um tamanho  $L$  desejado;
2. armazenar todos os operadores renormalizados utilizados durante o procedimento do algoritmo da **cadeia infinita**;
3. formar um bloco esquerdo de tamanho  $l + 1$  usando  $H_{l+1}^e$  (Hamiltoniano renormalizado pertencente ao bloco esquerdo), dois sítios e  $H_{l'-1}^d$  (Hamiltoniano renormalizado pertencente ao bloco direito). A configuração do superbloco é mostrado na figura 5.1, sendo  $l' = L - l - 2$ ;
4. efetuar, sobre o superbloco criado no passo anterior, os passos 3 ao 7 do algoritmo da **cadeia infinita**;
5. realizar a movimentação da "esquerda para a direita" do sweep, ou seja, aplicar o passo anterior várias vezes, gradativamente, aumentando o bloco esquerdo,  $l \rightarrow l+1$ , e diminuindo o bloco direito,  $l' \rightarrow l' - 1$  (até que  $l = L - 3$  e  $l' = 1$ ). Atualizam-se os  $H_l^e$  e  $H_l^r$  armazenados, bem como os operadores do bloco gerados a cada passo;
6. aplicar o passo 4, agora invertendo a movimentação de crescimento-decrescimento dos blocos: o bloco direito irá crescer um sítio enquanto o bloco esquerdo irá diminuir um sítio (movimentação "da direita para a esquerda" do sweep), até que  $l' = L - 3$  e  $l = 1$ ). Atualizam-se os  $H^e$  e  $H^r$  armazenados, bem como os operadores do bloco gerados a cada passo;

7. repetir os passos 5-6 até que o número de sweeps pré-definidos seja alcançado.

É importante frisar que para o caso do sistema simétrico por reflexão (simetria translacional na rede) os operadores da direita serão os mesmos da esquerda, diminuindo assim a necessidade de armazenamento dos operadores pela metade, ou seja, basta armazenar os  $H^e$ .

### 5.4.3 DMRG Aplicado ao Modelo 1D Antiferromagnético de Heisenberg

Para ilustrar o método de criação de blocos e o processo de truncagem dos autoestados através de um exemplo simples, iremos aplicar a técnica do DMRG na cadeia linear antiferromagnética de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ . Inicialmente começaremos com bloco formado apenas por um único sítio. Nesta situação, a base para esse bloco será:

$$\begin{aligned} |b_1\rangle &= |\uparrow\rangle, \\ |b_2\rangle &= |\downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{5.21}$$

Iremos usar  $B(p, 2^p)$  para indicar o bloco, e  $H(p, 2^p)$  para indicar o Hamiltoniano, de dimensão  $2^p$  formado por  $p$  sítios. Para nosso bloco inicial,  $B(1, 2)$ , que é constituído de um spin isolado, o Hamiltoniano,  $H(1, 2)$ , é nulo.

O bloco aumentado do sistema é criado adicionando a  $B(1, 2)$  outro sítio. Neste caso, a base do bloco coincide com a base que descreve o sítio adicionado,  $D(1, 2)$ :

$$\begin{aligned} |d_1\rangle &= |\uparrow\rangle, \\ |d_2\rangle &= |\downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{5.22}$$

Então, a base do bloco aumentado é formada por:

$$\begin{aligned}
|b_1^a\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle, \\
|b_2^a\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle, \\
|b_3^a\rangle &= |\downarrow\uparrow\rangle, \\
|b_4^a\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle.
\end{aligned} \tag{5.23}$$

O Hamiltoniano  $H(2, 4)$  para o **bloco aumentado** possui termos não nulos e descreve as interações entre os sítios dentro de  $B(2, 4)$ . O Hamiltoniano  $H(2, 4)$  será igual a soma do Hamiltoniano interno do bloco  $H(1, 2)$ , que descreveria as interações internas entre os spins que formam o bloco mais os termos de interação entre o sítio  $i$  mais a direita do bloco  $B(1, 2)$  e o novo sítio adicionado  $D(1, 2)$ .

Utilizando essa descrição, temos que o Hamiltoniano de interação para o bloco  $B(2, 4)$  é, tomando  $\hbar = 1$  :

$$H(2, 4) = H(1, 2) \otimes I_D + S_i^z \otimes S_D^z + \frac{1}{2} (S_i^+ \otimes S_D^- + S_i^- \otimes S_D^+). \tag{5.24}$$

Lembrando que  $H(1, 2)$  será nulo, nesta situação de um único spin interno, com  $I_s$  sendo uma matriz identidade  $2 \times 2$ . Usando a representação que utilize  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$  como base, temos a seguinte representação do Hamiltoniano  $H(2, 4)$ :

$$\begin{aligned}
H(2, 4) &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \left\{ \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \right\}. \\
&= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{5.25}$$

Assim, temos uma matriz que possui autovetores  $E_i$  dados por:

- 1 estado singlete  $|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ , com  $E_s = -\frac{3}{4}$ ;
- 3 estados degenerados :  $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\rangle \text{ e } \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)\}$ , com  $E_t = \frac{1}{4}$ .

A construção do **superbloco**  $B(4, 16)$  é realizada conectando-se ao bloco aumentado  $B(2, 4)$  a outro bloco aumentado  $B'(2, 4)$  (à direita). O Hamiltoniano do superbloco deverá ter, além dos Hamiltonianos dos blocos aumentados, a interação entre os sítios nas pontas dos blocos.

Os operadores de spin devem ser escritos em termos da base do superbloco  $B(4, 16)$ , para que todos os operadores tenham a mesmas dimensões. Por exemplo, o operador  $(S_2^+)_a = I_b \otimes S^+$ . As representações para os operadores  $(S_2^-)_a$  e  $(S_2^z)_a$  seguem de maneira análoga. A base para o superbloco  $\{|s_B\rangle\}$  é obtida com o produto tensorial das bases dos dois blocos aumentados,  $B(2, 4)$  e  $B'(2, 4)$ :

$$\{|s_B\rangle\} = \begin{bmatrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \end{bmatrix} \quad (5.26)$$

Assumindo que se deseja estudar as propriedades do estado fundamental (ou seja, o estado alvo escolhido em nosso exemplo será o estado fundamental), podemos explorar a conservação de  $S^z$  e o fato que o estado alvo pertencer ao subespaço com  $S^z = 0$ .

Assim, vamos nos concentrar apenas nos estados que seguem esta simetria de inversão de spins, ou seja, usar simetria para reduzir o espaço que iremos escrever nossos

operadores, ou seja:

$$\{|s_B^{S_z=0}\rangle\} = \{|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \text{ e } |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle\}. \quad (5.27)$$

A redução de um espaço  $16 \times 16$ , formado pela base  $\{|s_B\rangle\}$ , para um espaço  $6 \times 6$ , formado pela base  $\{|s_B^{S_z=0}\rangle\}$ , mostra a imensa utilidade de se usar as simetrias do problema em nosso favor.

A partir deste ponto, o Hamiltoniano do superbloco terá três partes: dois termos que contêm os Hamiltonianos internos de cada bloco aumentado,  $B(2, 4)$  e  $B'(2, 4)$ , e os termos referentes às interações dos sítios entre esses blocos:

$$\begin{aligned} H(4, 16) &= H(2, 4) \otimes 1' + 1 \otimes H'(2, 4) + (S^z) \otimes (S'^z) \\ &+ \frac{1}{2} \left[ (S^+) \otimes (S'^-) + (S^-) \otimes (S'^+) \right], \end{aligned} \quad (5.28)$$

onde os operadores com "linha" são aqueles referentes ao bloco aumentado da direita. Dessa forma, a representação de  $H(4, 16)$  no subespaço em que  $S^z = 0$ ,  $\{|sb^{S_z=0}\rangle\}$ , será:

$$H(4, 16)^{S_z=0} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & -3 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -3 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.29)$$

O menor autovalor da matriz  $H(4, 16)^{S_z=0}$  representa o estado fundamental com energia  $E_0 = \frac{1}{4} \left( 3 + 2\sqrt{3} \right)$ , cujo autovetor é dado por:



$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2\sqrt{3(2+\sqrt{3})}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1+\sqrt{3} \\ -2-\sqrt{3} \\ -2-\sqrt{3} \\ 1+\sqrt{3} \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (5.30)$$

A fim de decidir quais dos estados do bloco  $B(4,16)$  são os mais importantes (mais prováveis) para representar o estado fundamental do superbloco, precisa-se analisar quais são os maiores autovalores da matriz densidade reduzida (reduzida com respeito a um dos blocos aumentados) do estado  $|\Psi_0\rangle$  cuja representação matricial é:

$$\rho_{A_{ii'}} = \langle i|\hat{\rho}_A|i'\rangle = \sum_j \langle ij|\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|i'j\rangle = \sum_j \Psi_0^{ij} (\Psi_0^{i'j})^*. \quad (5.31)$$

Dentro da base  $\{|sb^{S^z=0}\rangle\}$  os coeficientes  $\Psi_0^{ij}$  não nulos serão :

- $\Psi_0^{14}$  referente ao ket:  $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle = |b_1^a\rangle \otimes |b_4^a\rangle$ ;
- $\Psi_0^{22}$  referente ao ket:  $|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle = |b_2^a\rangle \otimes |b_2^a\rangle$ ;
- $\Psi_0^{23}$  referente ao ket:  $|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle = |b_2^a\rangle \otimes |b_3^a\rangle$ ;
- $\Psi_0^{32}$  referente ao ket:  $|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = |b_3^a\rangle \otimes |b_2^a\rangle$ ;
- $\Psi_0^{33}$  referente ao ket:  $|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = |b_3^a\rangle \otimes |b_3^a\rangle$ ;
- $\Psi_0^{41}$  referente ao ket:  $|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle = |b_4^a\rangle \otimes |b_1^a\rangle$ .

Então, utilizando a equação 5.31 e os coeficientes  $\Psi_0^{ij}$  não nulos, pode-se encontrar a matriz densidade reduzida:

$$\rho_A = \frac{1}{12(2 + \sqrt{3})} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 11 + 6\sqrt{3} & -2(5 + 3\sqrt{3}) & 0 \\ 0 & -2(5 + 3\sqrt{3}) & 11 + 6\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.32)$$

Percebe-se que a matriz densidade  $\rho_A$  tem a mesma forma, bloco diagonal e simétrica, do Hamiltoniano do bloco aumentado  $H(2, 4)$ , de modo que teremos a mesma estrutura de autovetores:

- 1 estado singleto com energia  $w_s = \frac{1}{12(2+\sqrt{3})}$ ;
- 3 estados degenerados com energia  $w_t = \frac{21+12\sqrt{3}}{12(2+\sqrt{3})}$ .

Assim, apenas para fins didáticos, a truncagem de estados será feita com  $m = 2$ , ou seja, serão escolhidos apenas dois estados de maior energia da matriz de densidade reduzida  $\rho_A$ . Neste caso, um dos estados do tripleto e o estado singleto, para formarem a matriz mudança de base  $O$  do método do DMRG.

Ordenando os estados de maneira decrescente nas linhas da matriz  $O$ , tem-se:

$$O = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.33)$$

O Hamiltoniano  $H(4, 16)^{S_z=0}$  reescrito na base truncada através do operador  $O$  da seguinte forma:

$$\begin{aligned} H^{super} &= O^\dagger [H(4, 16)^{S_z=0}] O \\ H^{super} &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\ H^{super} &= \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Logicamente essa mudança de base deve ser efetuada sobre todos os operadores relevantes para a formação do superbloco, que no nosso caso são os operadores:

$$\begin{aligned}
(S_{B(4,16)}^z)_a &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\
(S_{B(4,16)}^+)_a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \\
(S_{B(4,16)}^-)_a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (5.35)
\end{aligned}$$

Se fosse predefinido  $m = 25$ , no início do cálculo, teríamos que continuar crescendo o sistema até atingirmos ao menos um bloco formado por 5 sítios,  $B(5, 32)$  para aplicar o procedimento de renormalização dos operadores utilizando o DMRG. A partir desse número de sítios, ultrapassaríamos o número de estados a serem mantidos e poderíamos truncar os operadores.

Assim, o procedimento seria exato até  $B(4, 16)$ . Apesar dos próximos passos levarem a blocos com mais sítios, o espaço de Hilbert estaria fixado em  $m = 25$  que, esquematicamente, pode ser representado por:

$$B(1, 2) \rightarrow B(2, 4) \rightarrow B(3, 8) \rightarrow B(4, 16) \rightarrow B(5, 25) \rightarrow B(6, 25) \dots \quad (5.36)$$

É importante frisar que uma redução de um espaço  $6 \times 6$ , formado pela base  $\{|s_B^{S^z=0}\}$ , para um espaço  $2 \times 2$  indica que a escolha de  $m = 2$  ocasiona uma grande perda de informação para uma cadeia de spin tão pequena, já que foram ignorados dois estados do tripleto no processo de truncagem. O erro associado a essa truncagem de 2 estados,  $\delta e$ , é

de 0.04. Tal valor é obtido por uma soma dos autovalores dos estados descartados:

$$\delta e = 1 - \sum_{\alpha=1}^m w_{\alpha}, \quad (5.37)$$

representando um erro muito alto devido a essa escolha. Em cálculos mais realistas, erros de truncagem normalmente não devem ultrapassar  $10^{-4}$ .  $m = 2$  foi escolhido apenas para fins didáticos.

## 5.5 Cálculo dos Observáveis no DMRG

Sabe-se que a análise de um sistema é feita pela medição dos observáveis associados ao sistema, ou melhor, através do valor esperado dos operadores associados ao sistema (operadores unitários para evolução temporal, operadores projeção para medidas, ...) utilizando estado alvo. Entretanto, uma representação sistemática dos operadores em uma generalização do esquema do MPS só foi proposta recentemente [187].

Pode-se verificar que, no algoritmo DMRG, o mínimo global de energia é obtido na configuração simétrica [186], tamanhos idênticos para os dois blocos aumentados. De maneira que a configuração simétrica torna-se importante para obtenção de grande parte dos observáveis de interesse.

Quando se trata de modelo de spins em rede, estamos interessados em valores esperados das correlações locais dos  $n$ -sítios, com relação a algum autoestado do Hamiltoniano. O processo iterativo de crescimento do algoritmo impõe a necessidade de 3 passos para a análise de correlações desse tipo: inicialização, atualização e o valor esperado final.

- **Inicialização** Seja  $\hat{M}_j$  um operador local que atua no sítio  $j$ , por exemplo, a magnetização local do sítio  $j$ . Quando este sítio é incluído no processo iterativo ao bloco de tamanho  $i - 1$ ,  $\langle s_i | \hat{M}_j | s'_i \rangle$  é avaliado.

Então, seja  $\{|\beta_i\rangle\}$  a base reduzida que reescreve o novo bloco, que inclui o sítio  $j$ , e  $\{|\beta_{i-1}\rangle\}$  a base do bloco antigo, temos assim:

$$\langle \beta_i | \hat{M}_j | \beta'_i \rangle = \sum_{\beta_{i-1}, s_i, s'_i} \langle \beta_i | \beta_{i-1} s_i \rangle \langle s_i | \hat{M}_j | s'_i \rangle \langle s'_i | \beta_{i-1} | \beta'_i \rangle. \quad (5.38)$$

- **Atualização** A cada passo do processo iterativo, ocorre uma mudança de base de

$\{|\beta_i\rangle\}$  para  $\{|\beta_{i+1}\rangle\}$ :

$$\langle\beta_{i+1}|\hat{M}_j|\beta'_{i+1}\rangle = \sum_{\beta_i, s_i, \beta'_i} \langle\beta_{i+1}|s_i\beta_i\rangle\langle\beta_i|\hat{M}_j|\beta'_i\rangle\langle\beta'_i s_i|\beta'_{i+1}\rangle. \quad (5.39)$$

- **Valor esperado final** Depois do último passo do algoritmo, teremos o bloco à esquerda, descrito pela base  $\{|\beta\rangle\}$  e o bloco a direita, descrito pela base  $\{|\tau\rangle\}$ .

Desta forma, saberemos calcular  $\langle\beta|\langle\tau|\Psi\rangle$  e , assumindo que  $\hat{M}_j$  atua num sítio pertencente ao bloco à esquerda,  $\langle\hat{M}_j\rangle$  resulta em:

$$\langle\Psi|\hat{M}_j|\Psi\rangle = \sum_{\beta\tau\beta'} \langle\Psi|\tau\beta\rangle\langle\beta|\hat{M}_j|\beta'\rangle\langle\beta'\tau|\Psi\rangle, \quad (5.40)$$

sendo  $|\Psi\rangle$  o estado alvo.

Quando se trata do valor esperado de dois operadores, que atuam em diferentes sítios da rede,  $\hat{S}_j$  e  $\hat{S}_q$ , devemos levar em consideração dois casos distintos:

- ambos os sítios,  $j$  e  $q$ , pertencentes a diferentes blocos:

Suponha que  $\{\alpha_e\}$  seja a base que descreve o bloco à esquerda e  $\{\alpha_d\}$  representa o outro bloco.

Então, o estado fundamental será dado por:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_e, \alpha_d} \langle\alpha_e\alpha_d|\Psi\rangle|\alpha_e\alpha_d\rangle = \sum_{\alpha_e, \alpha_d} \Psi_{\alpha_e\alpha_d}|\alpha_e\alpha_d\rangle. \quad (5.41)$$

Com essa relação, a correlação dos observáveis fica dada por:

$$\begin{aligned} \langle\hat{S}_j\hat{S}_q\rangle &= \langle\Psi|\hat{S}_j\hat{S}_q|\Psi\rangle \\ &= \sum_{\alpha_d, \alpha_e, \alpha'_d, \alpha'_e} \Psi_{\alpha'_d\alpha'_e}^* \Psi_{\alpha_e\alpha_d} \langle\alpha'_e\alpha'_d|\hat{S}_j\hat{S}_q|\alpha_e\alpha_d\rangle \\ &= \sum_{\alpha_d, \alpha_e, \alpha'_d, \alpha'_e} \Psi_{\alpha'_d\alpha'_e}^* \Psi_{\alpha_e\alpha_d} \langle\alpha'_e|\hat{S}_j|\alpha_e\rangle \langle\alpha'_d\hat{S}_q|\alpha_d\rangle \\ &= \sum_{\alpha_d, \alpha_e, \alpha'_d, \alpha'_e} \Psi_{\alpha'_d\alpha'_e}^* \Psi_{\alpha_e\alpha_d} (\hat{S}_j)_{ee'} (\hat{S}_q)_{dd'} \end{aligned} \quad (5.42)$$

- ambos os sítios,  $j$  e  $q$ , pertencentes ao mesmo bloco:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{S}_j \hat{S}_q \rangle &= \langle \Psi | \hat{S}_j \hat{S}_q | \Psi \rangle \\
&= \sum_{\alpha_d, \alpha_e, \alpha'_d, \alpha'_e} \Psi_{\alpha'_d \alpha'_e}^* \Psi_{\alpha_e \alpha_d} \langle \alpha'_e \alpha'_d | \hat{S}_j \hat{S}_q | \alpha_e \alpha_d \rangle \\
&= \sum_{\alpha_d, \alpha_e, \alpha'_d, \alpha'_e} \Psi_{\alpha'_d \alpha'_e}^* \Psi_{\alpha_e \alpha_d} \langle \alpha'_e | \hat{S}_j | \alpha_e \rangle \langle \alpha'_d | \hat{S}_q | \alpha_d \rangle \\
&= \sum_{\alpha_d, \alpha_e, \alpha'_e} \Psi_{\alpha_d \alpha'_e}^* \Psi_{\alpha_e \alpha_d} (\hat{S}_j \hat{S}_q)_{ee'}. \tag{5.43}
\end{aligned}$$

Precisa-se representar esse operador duplo com a mesma base (que passou pelos processos de seleção e truncagem) que utilizamos para o reescrever o Hamiltoniano. Entretanto, calcular esse operador como produto de dois operadores individuais, representados por uma base atualizada, é bastante complicado.

Imagine que  $\hat{S}_j$  atue sobre um bloco de tamanho  $i-1$  e  $\hat{S}_q$  atue num sítio que acabou de ser conectado ao bloco aumentado, dessa forma teríamos valores de  $\langle \alpha_{i-1} | \hat{S}_j | \alpha'_{i-1} \rangle$  e  $\langle s_i | \hat{S}_q | s'_i \rangle$  e em termos da base do bloco aumentado:

$$\{|\alpha_i\rangle\} \equiv \{|\alpha_{i-1}\rangle \otimes |s_i\rangle\} \tag{5.44}$$

Desta forma, o operador duplo torna-se:

$$\langle \alpha_i | \hat{S}_j \hat{S}_q | \alpha'_i \rangle = \sum_{\alpha_{i-1}, s_i, \alpha'_{i-1}, s'_i} \langle \alpha_i | \alpha_{i-1} \rangle \langle \alpha_{i-1} | \hat{S}_j | \alpha'_{i-1} \rangle \langle s_i | \hat{S}_q | s'_i \rangle \langle \alpha'_{i-1} | \alpha'_i \rangle. \tag{5.45}$$

Portanto, esse operador deve ser atualizado até que se atinja o passo final para o cálculo definitivo.

Deve se tomar cuidado, pois, no algoritmo da cadeia finita, dependendo da etapa do sweep, podemos estar em uma situação em que ambos operadores estão no mesmo bloco ou em outra em que eles estão em blocos diferentes.

Deste modo, fica evidente que armazenar e atualizar todos os "operadores compostos" exige bastante da capacidade de armazenamento computacional. A melhor opção, portanto, é calcular os operadores individuais e calcular a correlação apenas quando os sítios

estiverem em blocos distintos [186].

## 5.6 Cálculo da Magnetização através do DMRG

Como visto na sessão anterior, o cálculo do valor esperado dos operadores do sistema no método aproximativo do DMRG pode se tornar uma grande dor de cabeça, dependendo de uma série de fatores: posição operador na rede, tipo de rede, separação entre os operadores, entre outros fatores [186].

Uma solução alternativa para se calcular a magnetização local, para tubos quânticos de spin, foi proposto por A. Honecker e colaboradores [41].

O Hamiltoniano de um longo tubo de spins de comprimento  $L$  possui uma "circunferência" formada por  $N$  spins- $\frac{1}{2}$ . Esse modelo pode ser entendido como uma escada de spin- $\frac{1}{2}$  que possui condições de contorno periódicas para os  $N$  spins localizados nos degraus dessa escada, submetido a um campo externo  $h$ . Seu Hamiltoniano é descrito por:

$$H = J \sum_{i=1}^L \left( \sum_{j=1}^N \vec{S}_{i,j} \right) \cdot \left( \sum_{j=1}^N \vec{S}_{i+1,j} \right) + \frac{J'}{2} \sum_{i=1}^L \left[ \left( \sum_{j=1}^N \vec{S}_{i,j} \right)^2 - \frac{3N}{4} \right] - h \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^N S_{i,j}^z. \quad (5.46)$$

Então, podemos reescrever o Hamiltoniano  $H$  em função do spin total dos spins que formam a sua circunferência,  $\vec{t}_i = \sum_j^N \vec{S}_{i,j}$ . De modo que:

$$H = J \sum_{i=1}^L \vec{t}_i \cdot \vec{t}_{i+1} + \frac{J'}{2} \sum_{i=1}^L \left[ \left( \vec{t}_i \right)^2 - \frac{3N}{4} \right] - h \sum_{i=1}^L t_i^z. \quad (5.47)$$

Portanto, o problema é equivalente a uma cadeia linear de spins  $t_i$  submetida a um campo externo  $h$ . Nesse caso especial de rede de spin, supondo valores fixos para os acoplamentos  $J$  e  $J'$ , a energia pode ser escrita apenas em função do setor de magnetização, que o modelo se encontra, e do campo magnético  $h$ , pois  $\left( \vec{t}_i \right)^2$  é quantizado de acordo com a regra  $t_i(t_i + 1)$ , sendo  $t_i = \frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1, \dots$ .

O setor de magnetização do sistema é determinado pela soma das projeções  $t_i^z$ ,  $T^z = \sum_i^L t_i^z$ , e podemos relacioná-lo com o valor esperado da magnetização  $\langle M \rangle = \frac{2T^z}{LN}$ , indicando, como esperado, a relação direta entre o setor de magnetização e a própria magnetização do sistema.

Para obtermos a relação do campo externo  $h$  em função da energia,  $E(T^z, h)$ , podemos usar a identidade:

$$h = \frac{\partial E}{\partial T^z} = \frac{E(T_f^z, 0) - E(T_i^z, 0)}{T_f^z - T_i^z}, \quad (5.48)$$

fazendo  $T_f^z = T_i^z + 1$ , sendo  $T_f^z$  o setor final e  $T_i^z$  o setor inicial, próximo setor de magnetização da cadeia, temos:

$$h(T_i^z) = E(T_i^z + 1, 0) - E(T_i^z, 0). \quad (5.49)$$

Assim temos uma expressão para calcular o campo de transição  $h(T^z)$  entre diferentes estados de energia de setores de energia adjacentes,  $E(T^z, 0)$ , a campo nulo. Iremos definir  $h(0) = 0$ . Esse autovalores de energia podem ser facilmente encontrados utilizando as rotinas do DMRG, para cadeias de spin de Heisenberg na ausência de campo externo, contidas nos tutoriais do pacote de programação do ALPS [88].

Então, para cada setor de magnetização  $T_i^z$ , teremos um campo  $h(T_i^z)$  correspondente. Se considerarmos o modelo do tubo triangular ( $N = 3$ ) de spin- $\frac{1}{2}$  teremos 3 possíveis configurações para os autovalores  $t_i^z$  e  $t_{i+1}^z$ :

- **configuração 1:**  $t_i^z = \frac{1}{2}$  e  $t_{i+1}^z = \frac{1}{2}$ , neste tipo de configuração dos spins internos, podemos mapear o modelo original através de uma cadeia de spins- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg;
- **configuração 2:**  $t_i^z = \frac{1}{2}$  e  $t_{i+1}^z = \frac{3}{2}$ , neste tipo de configuração dos spins internos, podemos mapear o modelo original através de uma cadeia de spins mistos- $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$  de Heisenberg;
- **configuração 3:**  $t_i^z = \frac{3}{2}$  e  $t_{i+1}^z = \frac{3}{2}$ , neste tipo de configuração dos spins internos, podemos mapear o modelo original através de uma cadeia de spins- $\frac{3}{2}$  de Heisenberg;

De tal forma que com o aumento ou decréscimo do campo  $h(T_i^z)$  nosso sistema pode transitar de uma configuração  $A$  para uma configuração  $B$ , configurações em diferentes setores de magnetização não adjacentes, situação em que a magnetização  $M$  irá variar discontinuamente, conhecido como salto de magnetização [42]. Dentro de uma mesma



configuração pode ocorrer a formação de platôs de magnetização, onde a magnetização  $M$  permanece constante frente a variações do campo [40], ou a variação contínua da magnetização  $M$  com o campo  $h$  conhecido como estado de líquido de spin [47].

Podemos representar o comportamento da magnetização do tubo triangular de spins através da fig. 5.2. Neste diagrama de transição, vemos os campos  $h(T_i^z)$  associados a cada uma das 3 configurações (representadas por  $h(1/2, 1/2)$ ,  $h(1/2, 3/2)$  e  $h(3/2, 3/2)$ ), para o tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  com  $L = 12$ . Neste caso,  $h(T_i^z)$  será  $h_{min} = E_{SF} - E_{SA}$ , ou seja, será a diferença entre a energia do setor futuro que o sistema irá estar, entre as três configurações, representado por  $E_{SF}$ , menos a energia do setor anterior que o sistema se encontrava entre as três configurações, representado por  $E_{SA}$ .

O sistema irá selecionar em cada uma das três configurações através de uma busca pelo menor valor do campo  $h_{min}$  para a próxima transição que ele fará entre os setores superiores. Os valores de campo  $h_{min}$  utilizado para representar as transições entre as três configurações são meramente ilustrativos. A transição em roxo representa um salto da magnetização dentro de uma mesma configuração (configuração 1). A transição em azul representa um salto da magnetização entre configurações diferentes. As transições em verde são transições entre setores adjacentes dentro de uma mesma configuração. As regiões em vermelho são regiões proibidas para o mapeamento em questão, cujo setor de magnetização é maior que o da cadeia mapeada.

Figura 5.2: Diagrama de transição entre as 3 configurações, para o tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  com  $L = 12$ , através de uma busca pelo menor valor do campo  $h(T_i^z)$ . Os valores de campo utilizados para as três configurações são meramente ilustrativos. A transição em roxo representa um salto da magnetização dentro de uma mesma configuração (configuração 1). A transição em azul representa um salto da magnetização entre configurações diferentes. As transições em verde são transições entre setores adjacentes dentro de uma mesma configuração. As regiões em vermelho são regiões proibidas para o mapeamento em questão, cujo setor de magnetização é maior que o da cadeia mapeada.

$T^Z$	$h(1/2, 1/2)$	$h(1/2, 3/2)$	$h(3/2, 3/2)$
0	0,0	0,0	0,0
1	1,2	3,4	4,6
2	1,8	3,6	4,8
3	2,05	3,8	4,9
4	2,3	3,9	4,95
5	2,4	4,2	5,0
6	2,1	4,4	5,05
7		4,6	5,1
8		4,8	5,105
9		5,0	5,2
10		5,2	5,25
11		5,4	5,3
12		5,6	5,35
13			5,4
14			5,45
15			5,5
16			5,55
17			5,6
18			5,72

Fonte: Autor, 2017.

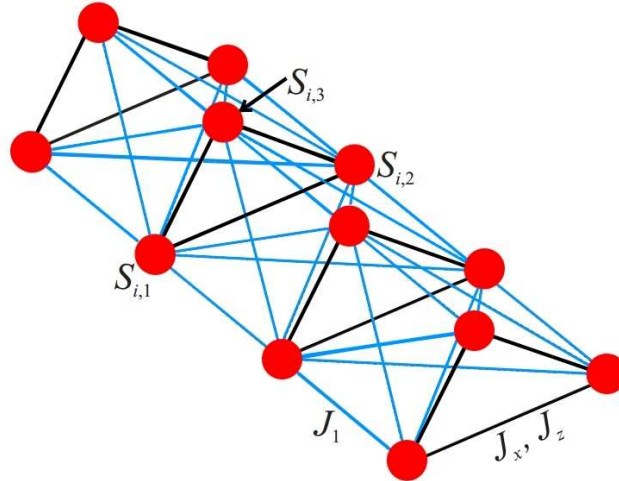
# TUBO TRIANGULAR DE SPIN- $\frac{1}{2}$ DE ISING-HEISENBERG

Nos capítulos pregressos, foram feitas breves revisões sobre o ferramentário teórico necessário para se obter as propriedades magnéticas, termodinâmicas e de emaranhamento em modelos de cadeias de spin. O agrupamento destas técnicas metodológicas será aplicado ao sistema magnético conhecido como tubo triangular de spins- $\frac{1}{2}$  [36, 51, 190, 46, 47].

Neste capítulo ocorrerá a apresentação do modelo e as definições das propriedades termodinâmicas e de emaranhamento de interesse. Assim, iniciaremos a primeira sessão mostrando a aplicação da técnica da matriz de transferência ao modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  frustrado de Ising-Heisenberg composto por células unitárias triangulares. Cada triângulo é composto por 3 spins conectados por ligações de Heisenberg tipo  $XXZ$ . Cada spin pertencente à célula unitária  $i$  é conectado a todos os spins da célula posterior  $i + 1$  através de ligações tipo Ising [36, 51], como representado na figura 6.1, Consideraremos condições de temperatura e campo externo aplicado não nulos.

O caso do modelo na ausência de campo externo, será tratado na próxima sessão como um caso particular do modelo geral inicialmente descrito. Este modelo não trivial usa uma aproximação semelhante a que foi utilizada na cadeia tetraédrica de spins- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg [191, 192].

Figura 6.1: Geometria do modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  frustrado de Ising-Heisenberg. As linhas sólidas representam os acoplamentos XXZ de Heisenberg dentro da célula unitária triangular ( $J_z, J_x$ ). As linhas finas correspondem às interações de Ising entre as células unitárias.



Fonte: Autor, 2017.

## 6.1 Tubo de Ising-Heisenberg na Presença do Campo Externo

### 6.1.1 Método

Se o modelo do tubo triangular frustrado de Ising-Heisenberg composto por células unitárias triangulares é colocado em equilíbrio térmico com um banho térmico a uma temperatura finita não-nula  $t$ , poderemos analisar uma grande gama de aspectos das propriedades termodinâmicas decorrentes do acréscimo da temperatura e do campo magnético externo aplicado  $h$ , extendendo assim a análise do modelo proposto em [36, 51] para temperaturas finitas através da técnica analítica exata da matriz de transferência.

Para iniciarmos o estudo, primeiro devemos definir o Hamiltoniano que será utilizado e descrever as interações entre os spins no modelo, ilustradas na fig. 6.1. A partir dele construiremos a matriz de transferência, encontrando a função de partição e as grandezas termodinâmicas de interesse.

Sendo assim, devido à aplicação de um campo externo  $h$  o modelo do tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg pode ser representado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i - h \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 S_{i,j}, \quad (6.1)$$

de modo que  $\mathcal{H}_i$  definirá o Hamiltoniano de interação para cada uma das células unitárias triangulares, formadas por 3 spins, bem como suas interações com as demais células vizinhas, representado por:

$$\mathcal{H}_i = \sum_{j=1}^3 \left[ J_x \left( S_{i,j}^x S_{i,j+1}^x + S_{i,j}^y S_{i,j+1}^y \right) + J_z S_{i,j}^z S_{i,j+1}^z \right] + J_1 \left( \sum_{j=1}^3 S_{i,j}^z \right) \left( \sum_{j=1}^3 S_{i+1,j}^z \right), \quad (6.2)$$

sendo  $S_{i,j}^\alpha$  a representação do operador de spin- $\frac{1}{2}$  no sítio  $j$ , o índice  $j$  descreve qualquer um dos 3 spins localizados nos vértices do triângulo da célula unitária  $i$ , com  $\alpha \in x, y$  e  $z$  demarcando as respectivas componentes espaciais do operador. Os termos de interação  $J_x$  e  $J_z$  definem as acoplamentos anisotrópicos, tipo XXZ, dentro da célula unitária triangular e as ligações  $J_1$  caracterizam as interações de Ising entre spins pertencentes a células unitárias distintas.

Por conseguinte, o conjunto de parâmetros de troca ( $J_x$ ,  $J_z$  e  $J_1$ ) surge com motivações puramente quânticas, resultado da repulsão Coulombiana entre as cargas elétricas e das restrições impostas à função de onda pelo princípio de Pauli. Experimentalmente, o valor da interação de troca é obtido por meio de medidas da susceptibilidade magnética dos compostos magnéticos, cujas curvas são ajustadas por aquelas obtidas da diagonalização do modelo teórico 6.2.

Uma particularidade destes modelos tipo escada de spins [190, 46, 47], como no caso do tubo de spin triangular na ausência de campo [36], é que o Hamiltoniano total 6.2 pode ser escrito alternativamente numa base soma, que representa o spin total da célula unitária e sua componente na direção  $z$ ,  $\mathbf{T}_i = \sum_{j=1}^3 \mathbf{S}_{i,j}$  e  $T_i^z = \sum_{j=1}^3 S_{i,j}^z$ , respectivamente.

Nosso foco será a diagonalização desta cadeia com  $N$  células unitárias triangulares, sujeitas a condições de contorno periódicas, com invariância translacional. Pela imposição do campo uniforme e escolhendo o eixo de simetria na direção  $z$ ,  $\mathbf{T}_i^2$  e  $T_i^z$  serão conservados. Desta forma, os principais operadores do sistema irão comutar entre si e, portanto, compartilharão uma base comum de autovetores, explorando-se as possibilidades de comutação entre os operadores:

$$[\mathcal{H}, \mathcal{H}_i] = [\mathcal{H}, \mathbf{T}_i^2] = [\mathcal{H}, T_i^z] = 0, \quad (6.3)$$

, percebemos que o momento angular de spin total, na verdade, o quadrado do momento total  $\mathbf{T}_i^2$ , e sua componente na direção  $z$  tornam-se bons números quânticos para descrever

o sistema.

Um atalho matemático conveniente, para simplificar os cálculos, é usar a identidade algébrica:

$$\left(T_i^\alpha\right)^2 = \frac{3}{4} - 2\left(S_{i,1}^\alpha S_{i,2}^\alpha + S_{i,1}^\alpha S_{i,3}^\alpha + S_{i,2}^\alpha S_{i,3}^\alpha\right), \quad (6.4)$$

para reescrever o Hamiltoniano 6.2 em uma forma mais conveniente:

$$\mathcal{H} = -\frac{3N}{8}\left(2J_x + J_z\right) + \sum_i \hat{H}_i \quad (6.5)$$

A primeira parcela representa uma constante que irá simplesmente reescalar a energia, enquanto o segundo termo é a soma dos Hamiltonianos internos  $\hat{H}_i$ , que agora relaciona os dois operadores de células unitárias consecutivas  $\vec{T}_i^2$  e  $\vec{T}_{i+1}^2$ , bem como suas projeções no eixo  $z$ :

$$\hat{H}_i = J_1 T_i^z T_{i+1}^z + \frac{J_x}{4}\left(\vec{T}_i^2 + \vec{T}_{i+1}^2\right) + \frac{\left(J_z - J_x\right)}{4}\left[\left(T_i^z\right)^2 + \left(T_{i+1}^z\right)^2\right] - \frac{h}{2}\left(T_i^z + T_{i+1}^z\right), \quad (6.6)$$

sendo  $\vec{T}_i^2 = T_i(T_i + 1)$  e  $T_i^z = -T_i, -T_i + 1, \dots, T_i$ .

Então, pela introdução do spin total do triângulo de Heisenberg, este modelo pode ser rigorosamente mapeado em uma cadeia linear onde cada célula unitária é representada por um único spin total, mapeando o modelo do tubo triangular de spins em 3 cadeias lineares de spin: cadeia unidimensional de spin- $\frac{3}{2}$ , cadeia linear de spin misto  $\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right)$  e o modelo unidimensional de spin  $\frac{1}{2}$  [58, 193, 194]. Essas cadeias lineares de spins clássicas podem ser tratadas pelo método da matriz de transferência [195].

A diagonalização da equação 6.5 permite de forma exata a obtenção através do método da matriz de transferência de todas as quantidades termodinâmicas desejáveis. Além disso, a equação 6.6 pode ser usada diretamente para se obter todos os estados fundamentais para as diversas combinações de acoplamentos  $(J_x, J_z$  e  $J_1)$  para formar o diagrama de fase do modelo [148].

A primeira grandeza termodinâmica de interesse é a função de partição canônica, que descreverá as propriedades estatísticas desse sistema quando ele se encontrar em equilíbrio térmico. Esta função leva em conta a soma das energias de todos os estados  $i$  do

sistema. Desta forma, para obter os resultados exatos para as quantidades termodinâmicas, precisamos construir inicialmente a função de partição para o Hamiltoniano 6.6:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = e^{\frac{3N\beta}{8}(2J_x + J_z)} \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_i} \\ &= e^{\frac{3N\beta}{8}(2J_x + J_z)} \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N \mathbf{T}(T_i, T_i^z; T_{i+1}, T_{i+1}^z) = e^{\frac{3N\beta}{8}(2J_x + J_z)} \text{Tr}(\mathbf{T})^N, \end{aligned} \quad (6.7)$$

onde  $\beta = \frac{1}{\kappa_\beta t}$ , sendo  $\kappa_\beta$  a constante de Boltzmann,  $t$  a temperatura absoluta e a soma  $\sum_{\{S_i\}}$  descreve todos os possíveis graus de liberdade no espaço de configurações da variável  $\{S_i\}$ . Então, pode-se finalmente representar a matriz de transferência  $\mathbf{T}(T_i, T_i^z; T_{i+1}, T_{i+1}^z)$  como:

$$\mathbf{T}(T_i, T_i^z; T_{i+1}, T_{i+1}^z) = \langle S_i S_i^z | e^{-\beta \hat{H}_i} | S_{i+1} S_{i+1}^z \rangle =$$

$$\begin{pmatrix} q^3 r^9 u^9 s^3 & q^5 r^5 u^3 s^2 & q^5 r^5 u^{-3} s & q^3 r^9 u^{-9} & q^2 u^5 z^3 s^2 & q^2 r^5 u^{-3} s & q^2 r^5 u^3 s^2 & q^2 r^5 u^{-3} s \\ q^5 r^5 u^3 s^2 & q^7 r u s & q^7 r u^{-1} & q^5 r^5 u^{-3} s^{-1} & q^4 r u s & q^4 r u^{-1} & q^4 r u s & q^4 r u^{-1} \\ q^5 r^5 u^{-3} s & q^7 r u^{-1} & q^7 r u s^{-1} & q^5 r^5 u^3 s^{-2} & q^4 r u^{-1} & q^4 y z s^{-1} & q^4 y z^{-1} & q^4 y z s^{-1} \\ q^3 r^9 u^{-9} & q^5 r^5 u^{-3} s^{-1} & q^5 r^5 u^3 s^{-2} & q^3 r^9 u^9 s^{-3} & q^2 r^5 u^{-3} s^{-1} & q^2 r^5 u^3 s^{-2} & q^2 r^5 u^{-3} s^{-1} & q^2 r^5 u^3 s^{-2} \\ q^2 r^5 u^3 s^2 & q^4 r u s & q^4 r u^{-1} & q^2 r^5 u^{-3} s^{-1} & q r u s & q r u^{-1} & q r u s & q r u^{-1} \\ q^2 r^5 u^{-3} s & q^4 r u^{-1} & q^4 r u s^{-1} & q^2 r^5 u^3 s^{-2} & q r u^{-1} & q r u s^{-1} & q r u^{-1} & q r u s^{-1} \\ q^2 r^5 u^3 s^2 & q^4 r u s & q^4 r u^{-1} & q^2 r^5 u^{-3} s^{-1} & q r u s & q r u^{-1} & q r u s & q r u^{-1} \\ q^2 r^5 u^{-3} s & q^4 r u^{-1} & q^4 r u s^{-1} & q^2 r^5 u^3 s^{-2} & q r u^{-1} & q r u s^{-1} & q r u^{-1} & q r u s^{-1} \end{pmatrix}, \quad (6.8)$$

onde  $q$ ,  $r$  e  $u$  foram introduzidos para simplificar a notação da matriz de transferência, sendo  $q = e^{-\frac{\beta J_z}{4}}$ ,  $r = e^{-\frac{\beta J_x}{8}}$ ,  $s = e^{\frac{\beta h}{2}}$  e  $u = e^{-\frac{\beta J_1}{4}}$ . Os elementos matriz de transferência  $\mathbf{T}$  representam os chamados pesos de Boltzmann e dão uma medida de probabilidade do sistema encontrar-se no estado  $i$ .

Agora, se faz necessário encontrar o maior autovalor da matriz de transferência, pela resolução da equação secular:

$$\text{Det}(\mathbf{T}(T_i, T_i^z; T_{i+1}, T_{i+1}^z) - \mathcal{I}\lambda) = 0. \quad (6.9)$$

Utilizando as propriedades dos determinantes [188], teremos que 4 dos 8 autovalores

são nulos ( $\lambda_8 = \lambda_7 = \lambda_6 = \lambda_5 = 0$ ).

Para confirmar a validade desta informação, iremos usar a seguinte propriedade dos determinantes: se a uma linha ou coluna de uma matriz quadrada somamos outra paralela a ela multiplicada por um número, seu determinante não altera [196].

Então, propomos a aplicação das seguintes operações com as colunas, supondo que as colunas são enumeradas da esquerda para direita de 1 a 8, da equação secular:

1. (oitava coluna)  $-$  (sexta coluna)  $\rightarrow$  sexta coluna;
2. (sétima coluna)  $-$  (quinta coluna)  $\rightarrow$  quinta coluna;
3.  $q^3 \times$ (sétima coluna)  $-$  (segunda coluna)  $\rightarrow$  sétima coluna;
4.  $q^3 \times$ (oitava coluna)  $-$  (terceira coluna)  $\rightarrow$  oitava coluna.

O conjunto destas operações, aplicadas ao determinante 6.9, simplifica a equação secular para uma matriz  $6 \times 6$  dada por:

$$\text{Det} \begin{bmatrix} q^3 r^9 u^9 s^3 - \lambda & q^5 r^5 u^3 s^2 & q^5 r^5 u^{-3} s & q^3 r^9 u^{-9} & 0 & 0 \\ q^5 r^5 u^3 s^2 & q^7 r u s - \lambda & q^7 r u^{-1} & q^5 r^5 u^{-3} s^{-1} & -\lambda & 0 \\ q^5 r^5 u^{-3} s & q^7 r u^{-1} & q^7 r u s^{-1} - \lambda & q^5 r^5 u^3 s^{-2} & 0 & -\lambda \\ q^3 r^9 u^{-9} & q^5 r^5 u^{-3} s^{-1} & q^5 r^5 u^3 s^{-2} & q^3 r^9 u^9 s^{-3} - \lambda & 0 & 0 \\ q^2 r^5 u^3 s^2 & q^4 r u s & q^4 r u^{-1} & q^2 r^5 u^{-3} s^{-1} & -\lambda q^3 & 0 \\ q^2 r^5 u^{-3} s & q^4 r u^{-1} & q^4 r u s^{-1} & q^2 r^5 u^3 s^{-2} & 0 & -\lambda q^3 \end{bmatrix} = 0. \quad (6.10)$$

De forma análoga, propomos a aplicação de novas operações usando as linhas, supondo que as linhas são enumeradas da cima para baixo de 1 a 8, da equação secular:

1.  $q^3 \times$ (segunda linha)  $+$  (quinta linha)  $\rightarrow$  segunda linha;
2.  $q^3 \times$ (terceira linha)  $+$  (sexta linha)  $\rightarrow$  terceira linha.

Essas duas operações, aplicadas ao determinante 6.10, possibilitam uma nova redução para a matriz 6.10 numa nova matriz  $4 \times 4$ :

$$\text{Det} \begin{bmatrix} q^3 r^9 u^9 s^3 - \lambda & q^2 r^5 u^3 s^2 & q^2 r^5 u^{-3} s & q^3 r^9 u^{-9} \\ q^2 r^5 u^3 s^2 & q r u s - \frac{\lambda}{(q^6+2)} & q r u^{-1} & q^2 r^5 u^{-3} s^{-1} \\ q^2 r^5 u^{-3} s & q r u^{-1} & q r u s^{-1} - \frac{\lambda}{(q^6+2)} & q^2 r^5 u^3 s^{-2} \\ q^3 r^9 u^{-9} & q^2 r^5 u^{-3} s^{-1} & q^2 r^5 u^3 s^{-2} & q^3 r^9 u^9 s^{-3} - \lambda \end{bmatrix} = 0. \quad (6.11)$$



Como se pode observar, através da equação 6.11, temos a confirmação que 4 dos 8 autovalores são nulos ( $\lambda_8 = \lambda_7 = \lambda_6 = \lambda_5 = 0$ ). Então, através cálculo direto do determinante da equação 6.11, obtemos uma equação secular de quarto grau em  $\lambda$ :

$$\lambda^4 + A\lambda^3 + B\lambda^2 + C\lambda + D = 0, \quad (6.12)$$

cujos coeficientes são, respectivamente:

$$A = qru \left[ q^2 r^8 u^8 \cosh \left( \frac{3\beta h}{2} \right) + 2(q^6 + 2) \cosh \left( \frac{\beta h}{2} \right) \right] \quad (6.13)$$

$$B = 2q^2 r^2 \left\{ q^2 r^8 (q^6 + 2) \left[ u^6 (u^4 - 1) \cosh (2\beta h) + (u^{10} - u^{-6}) \right. \right. \\ \left. \left. \times \cosh (\beta h) \right] - q^4 r^{16} \sinh \left( \frac{9\beta J_1}{2} \right) - (q^6 + 2)^2 \sinh \left( \frac{\beta J_1}{2} \right) \right\} \quad (6.14)$$

$$C = 4(q^6 + 2)r^{11}q^5 \left\{ q^2 r^8 u \left[ \sinh \left( \frac{9\beta J_1}{2} \right) - u \sinh (3\beta J_1) \right. \right. \\ \left. \left. - u^2 \sinh \left( \frac{3\beta J_1}{2} \right) \right] \cosh \left( \frac{\beta h}{2} \right) + \left[ u^9 (q^6 + 2) \sinh \left( \frac{\beta J_1}{2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. - u^3 \sinh (\beta J_1) + u^{-3} \sinh \left( \frac{\beta J_1}{2} \right) \right] \cosh \left( \frac{3\beta h}{2} \right) \right\} \quad (6.15)$$

$$D = 4(q^6 + 2)^2 q^8 r^{20} \left\{ \sinh \left( \frac{3\beta J_1}{2} \right) \left[ \sinh \left( \frac{3\beta J_1}{2} \right) + 2 \sinh \left( \frac{\beta J_1}{2} \right) \right] \right. \\ \left. + \sinh \left( \frac{9\beta J_1}{2} \right) \sinh \left( \frac{\beta J_1}{2} \right) - 2 \sinh (3\beta J_1) \sinh (\beta J_1) \right\}. \quad (6.16)$$

Assim, por conveniência escolheu-se uma representação trigonométrica para simplificar a notação dos coeficientes, foi adotada a relação matemática  $(u^{-c} - u^c) = 2 \sinh(\frac{\beta c J_1}{4})$ .

Através da versão numérica da solução da equação de quarto grau pelo método proposto por Neumark [197, 198], pode se encontrar exatamente o maior autovalor dentre as quatro raízes da equação 6.12,  $\lambda_{\max} = \max\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\}$ , para qualquer conjunto dos parâmetros  $\{J_1, J_x, J_z, h\}$  pertencentes aos  $\mathbb{R}$ . O método numérico será descrito no apêndice A.

No limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ , a energia livre de Helmholtz por célula unitária é determinada pelo maior autovalor entre as duas raízes da equação,  $\lambda_{\max} = \max\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\}$ . Vale frisar que, a energia livre de Helmholtz é a energia interna que pode ser transformada

em trabalho realizado pelo sistema sobre sua vizinhanças a temperatura constante.

Então, em termos quantitativos, a energia livre de Helmholtz é definida por:

$$f = -\beta^{-1} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = -\frac{3(2J_x + J_z)}{8} - \beta^{-1} \ln \lambda_{\max}. \quad (6.17)$$

Aplicando o maior autovalor da equação 6.12 na expressão referente a energia livre de Helmholtz 6.20, pode-se definir grandezas termodinâmicas do sistema como entropia, a magnetização e calor específico, através de derivadas numéricas [199] da função 6.20.

A magnetização do sistema decorre do momento magnético de spin dos elétrons, ou seja, ocorre magnetização do material quando a soma dos momentos magnéticos de spin é diferente de zero. Podemos definir a magnetização por spin  $m$  desta rede como:

$$m = \frac{1}{3N} \left\{ \frac{1}{Z} \mathbf{Tr} \left[ \left( \hat{S}_{j,i}^z \right) e^{-\beta \hat{H}} \right] \right\} = \frac{1}{3N} \frac{\partial f}{\partial (\beta h)}. \quad (6.18)$$

Sendo assim, os spins da rede tenderão a se alinhar paralelamente ao campo magnético externo  $h$  aplicado, resultado em uma magnetização que irá aumentar com o campo até o valor unitário de saturação, se for normalizada pelo valor de saturação  $\frac{1}{2}$ .

A entropia por spin  $s$  é obtida através de uma relação fundamental da variação da energia livre 6.20 em função da temperatura do sistema mantendo-se a magnetização constante:

$$s = - \left( \frac{\partial f}{\partial T} \right)_m. \quad (6.19)$$

De acordo com a segunda lei da termodinâmica, trabalho pode ser completamente convertido em calor, mas o inverso não é possível. Com a entropia procura-se mensurar a parcela de energia que não pode mais ser transformada em trabalho em transformações termodinâmicas a dada temperatura.

A terceira lei da termodinâmica, conhecido como teorema de Nernst, afirma que a entropia de um sistema no zero absoluto é uma constante bem definida. Então, quando tivermos tratando do tubo de spin à temperatura de zero, a entropia é determinada apenas pela degenerescência do estado fundamental que o sistema se encontra.

Outra grandeza importante para o sistema é o calor específico, grandeza que relaciona a variação térmica de determinada substância ao receber uma certa quantidade de calor

devido, unicamente, a uma diferença de temperatura [59]. Assim, o calor específico por spin é uma grandeza térmica positiva definida  $C \geq 0$ , e está associada à entropia pela relação:

$$C = T \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_m. \quad (6.20)$$

As funções de correlação do sistema revelarão informações parciais sobre as correlações de curto alcance que estão presentes em um estado, descrevendo como os graus de liberdade de um spins são afetados por seus vizinhos. Assim, as 2 funções de correlação spin-spin, para os 3 spins no interior da célula unitária de Heisenberg, podem ser obtidas através por:

$$C_{11}^{ZZ} = \frac{1}{3Z} \mathbf{Tr} \left[ \left( \hat{S}_{j,i}^z \hat{S}_{j+1,i}^z \right) e^{-\beta \hat{H}} \right] = -\frac{1}{3} \left( \frac{\partial f}{\partial J_z} \right)_T \quad (6.21)$$

$$C_{11}^{XX} = \frac{1}{3Z} \mathbf{Tr} \left[ \left( \hat{S}_{j,i}^x \hat{S}_{j+1,i}^x \right) e^{-\beta \hat{H}} \right] = \frac{1}{3Z} \mathbf{Tr} \left[ \left( \hat{S}_{j,i}^y \hat{S}_{j+1,i}^y \right) e^{-\beta \hat{H}} \right] = -\frac{1}{6} \left( \frac{\partial f}{\partial J_x} \right)_T. \quad (6.22)$$

A correlação referente ao par de spins que estão em diferentes células unitárias, integrando através das 9 ligações de Ising  $J_1$ , pode ser obtida de forma análoga às expressões anteriores

$$C_{1,2}^{ZZ} = \frac{1}{9Z} \mathbf{Tr} \left( \hat{S}_{j,i}^z \hat{S}_{j,i+1}^z \right) e^{-\beta \hat{H}} = -\frac{1}{9} \left( \frac{\partial f}{\partial J_1} \right)_T. \quad (6.23)$$

O comportamento destas correlações, equações 6.21, 6.22 e 6.23, irá definir a dinâmica de orientação dos momentos magnéticos do modelo em relação às variações de temperatura e do campo externo.

### 6.1.2 Resultados e Discussões

Agora iremos discutir os mais importantes resultados sobre o tubo frustrado de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg, na presença de um reservatório térmico e sobre a ação de um campo magnético externo, assumindo o caso particular onde as interações de Ising,  $J_1$ , são antiferromagnéticas.

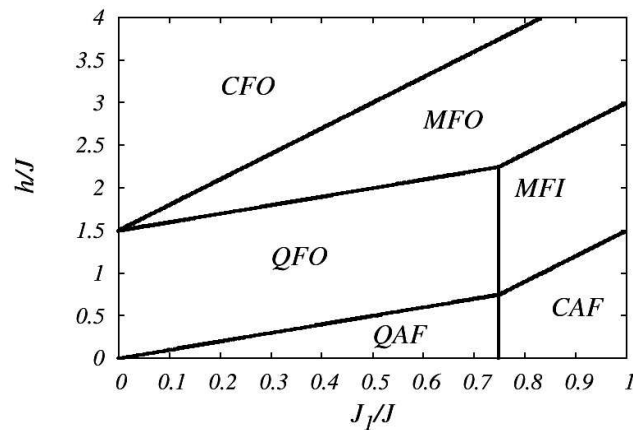
Por simplicidade, iremos avaliar o caso isotrópico para as ligações de Heisenberg no

interior das células unitárias triangulares:  $J_x = J_z = J$ . Pelo mesmo motivo, a constante de Boltzmann também será imposta como unidade  $k_B = 1$ .

Se caso definirmos o acoplamento  $J_1 < 0$ , o comportamento geral seria semelhante, pois os estados das células unitárias nos triângulos adjacentes são uma mera inversão sobre a transformação  $J_1 \rightarrow -J_1$ .

### Diagrama de fases do estado fundamental

Figura 6.2: Diagrama de fase do estado fundamental do modelo de tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg tube no plano  $J_1/J - h/J$ , definindo 6 possibilidades para os estado fundamental do modelo.



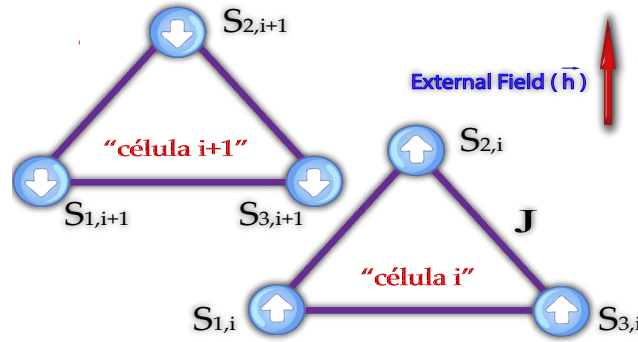
Fonte: Autor, 2017.

Todas as possíveis configurações de ordenamento magnético, para o estado fundamental do sistema, que descrevem o diagrama de fase do modelo no espaço de parâmetros ( $J_x = J_z = J$ ,  $J_1$  e  $h$ ), foram obtidas através da diagonalização do Hamiltoniano, eq. 6.6. Como o Hamiltoniano total comuta com o hamiltoniano das células unitárias triangulares, o ordenamento dos pares de células unitárias triangulares adjacentes irá descrever o ordenamento global de todo o modelo. O diagrama de estado fundamental do modelo triangular Ising-Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$  é descrito na figura 6.2.

Desta forma, foram encontrados apenas seis estados fundamentais, para os pares de células unitárias adjacentes, em função do conjunto de parâmetros ( $J_x = J_z = J$ ,  $J_1$  e  $h$ ) definido. Por inspeção, os seis estados fundamentais são:

- estado antiferromagnético clássico (CAF):

Figura 6.3: Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento antiferromagnético clássico.

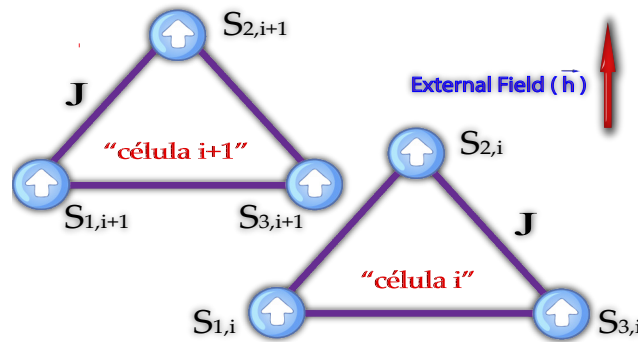


Fonte: Autor, 2017.

$$|\text{CAF}\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j-1} \otimes |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle_{2j-1} \otimes |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j} \end{cases} ; \quad (6.24)$$

- estado ferromagnético clássico (CFO)

Figura 6.4: Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento ferromagnético clássico.

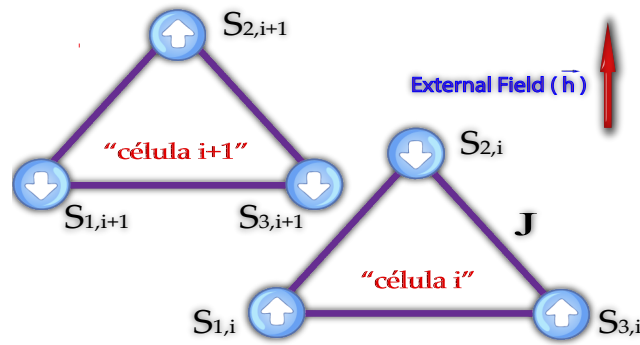


Fonte: Autor, 2017.

$$|\text{CFO}\rangle = \prod_{i=1}^N |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_i ; \quad (6.25)$$

- estado antiferromagnético quântico (QAF)

Figura 6.5: Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento antiferromagnético quântico.

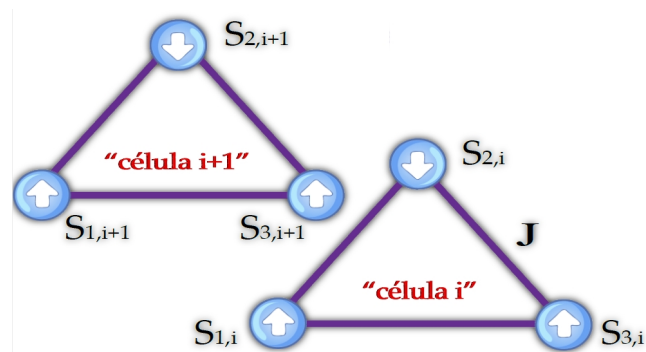


Fonte: Autor, 2017.

$$|\text{QAF}\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j-1} \otimes \left| -\frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} \left| -\frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j-1} \otimes \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j} \end{cases} ; \quad (6.26)$$

- estado ferrimagnético quântico (QFO)

Figura 6.6: Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento ferrimagnético quântico.

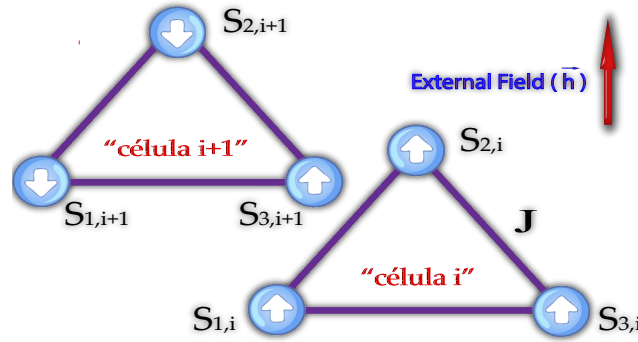


Fonte: Autor, 2017.

$$|\text{QFO}\rangle = \prod_{j=1}^N \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_j ; \quad (6.27)$$

- estado misto quântico-clássico ferrimagnético (MFI)

Figura 6.7: Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento misto quântico-clássico ferrimagnético.

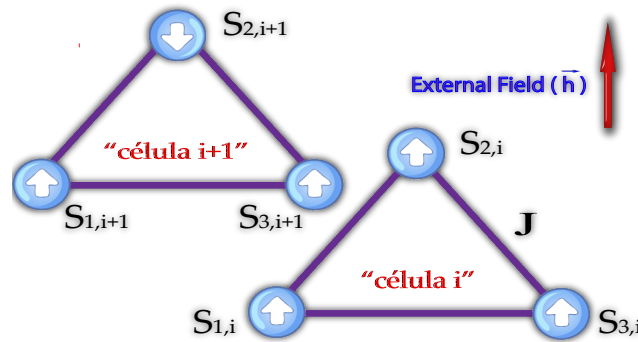


Fonte: Autor, 2017.

$$|\text{MFI}\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j-1} \otimes |-\frac{1}{2}, L \text{ or } R\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} |-\frac{1}{2}, L \text{ or } R\rangle_{2j-1} \otimes |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j} \end{cases} ; \quad (6.28)$$

- estado misto quântico-clássico ferromagnético (MFO)

Figura 6.8: Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento misto quântico-clássico ferromagnético.



Fonte: Autor, 2017.

$$|\text{MFO}\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j-1} \otimes |\frac{1}{2}, L \text{ or } R\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} |\frac{1}{2}, L \text{ or } R\rangle_{2j-1} \otimes |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j} \end{cases} ; \quad (6.29)$$

Acima, foi introduzido, a fim de facilitar a notação, os autovetores da  $j$ -ésima célula triangular de spins  $|\pm 1/2, R\rangle_j$  e  $|\pm 1/2, L\rangle_j$  com o spin total  $T_j^z = \pm 1/2$ , possuindo duas quiralidades opostas (à direita e à esquerda):

$$\begin{aligned}
\left|\frac{1}{2}, R\right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \right)_j \\
\left|\frac{1}{2}, L\right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \right)_j \\
\left|-\frac{1}{2}, R\right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right)_j \\
\left|-\frac{1}{2}, L\right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right)_j.
\end{aligned} \tag{6.30}$$

Os autovalores de energia, correspondentes aos autovetores descritos, são definidos por:

$$\begin{aligned}
E_{\text{CAF}} &= -\frac{9J_1}{4} + \frac{3J}{4}, \\
E_{\text{CFO}} &= \frac{9J_1}{4} + \frac{3J}{4} - \frac{3h}{2}, \\
E_{\text{QAF}} &= -\frac{J_1}{4} - \frac{3J}{4}, \\
E_{\text{QFO}} &= \frac{J_1}{4} - \frac{3J}{4} - \frac{h}{2}, \\
E_{\text{MFI}} &= -\frac{3J_1}{4} - \frac{h}{2}, \\
E_{\text{MFO}} &= \frac{3J_1}{4} - h.
\end{aligned} \tag{6.31}$$

É interessante frisar, observando os autovetores (6.24)-(6.29), que quatros estados fundamentais: CAF, QAF, MFI e MFO, possuem uma quebra na simetria translacional, possuem uma alternância e tendência a antiparalelismo entre os ordenamentos da células triangulares adjacentes, ocasionado pelos acoplamentos antiferromagnéticos  $J_1$ , diferindo dos outros dois estados fundamentais ferromagnéticos, CFO e QFO, que possuem simetria translacional (mesmo ordenamento entre células triangulares adjacentes).

Além disso, os graus de liberdade devidos a quiralidade do 3 spins contidos nos triângulos de Heisenberg, para os ordenamentos (6.30), com total spin  $T_j = \frac{1}{2}$  são responsáveis pela degenerescência macroscópica para os estados fundamentais: QAF, QFO, MFI e MFO.

O estado fundamental antiferrromagnético quântico, QAF, é o de maior entropia residual,  $S = (N + 1)k_B \ln 2$ , devido aos graus de liberdade quirais (6.30), ao passo que os



estados mistos, MFI e MFO, têm uma entropia residual menor,  $S = (\frac{N}{2} + 1)k_B \ln 2$ , pois são formados por uma combinação de dois ordenamentos característicos para as células pares e ímpares: uma célula triangular par, numa posição  $i$ , num ordenamento ferromagnético clássico (CFO) alternada por célula ímpar, localizada na posição adjacente  $(i + 1)$ , representada pelos ordenamentos quirais (6.30).

Para campo magnético nulo,  $h = 0$ , as fases antiferromagnéticas: QAF e CAF, ambas com magnetização nula, surgem como os dois estados fundamentais. O estado fundamental antiferromagnético quântico, QAF, com características quânticas é estável na região de parâmetros com predominância dos acoplamentos internos de Heisenberg,  $J$ , (acoplamentos quânticos) de cada célula sobre os acoplamentos externos de Ising (acoplamentos clássicos),  $\frac{J_1}{J} < \frac{3}{4}$ , enquanto o estado fundamental antiferromagnético clássico, CAF, é estável para regiões de valores mais intensos para os acoplamentos de Ising:  $\frac{J_1}{J} > \frac{3}{4}$ .

Os ordenamentos fortemente antiferromagnéticos, inerentes aos estados fundamentais QAF e CAF, serão quebrados com o aumento do campo magnético externo, ou melhor, quando o campo magnético externo se aproximar do primeiro valor crítico de transição:  $h_{c1}$ . Quando o sistema se encontrar acima deste valor crítico de transição, duas outras fases quânticas não usuais, QFO e MFI, irão aparecer.

Observando a figura 6.2, vemos que o estado fundamental antiferromagnético quântico, QAF, se transforma no estado ferromagnético quântico, QFO, o campo magnético externo induz o alinhamento de um dos spins da célula triangular, mudando o total spin  $T^z = -\frac{1}{2}$  da célula para  $T^z = \frac{1}{2}$ , após cruzamos a linha de campo crítico  $h_{c1} = J_1$ . O estado antiferromagnético clássico, CAF, evolui para a fase mista ferrimagnética, MFI, acima do campo crítico  $h_{c1} = 3J_1 - 3\frac{J}{2}$ .

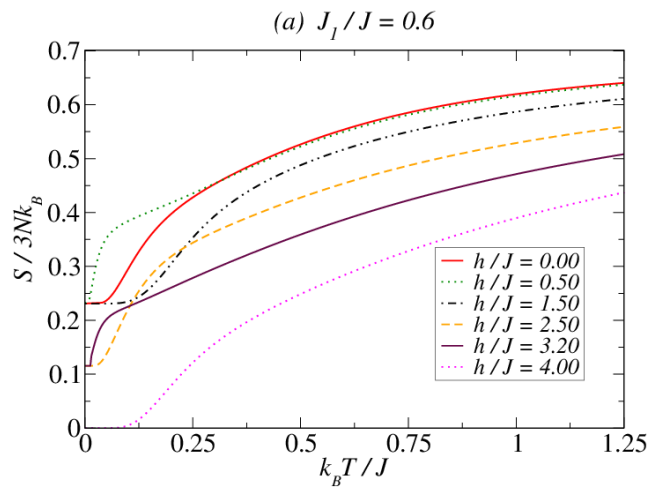
Os estados antiferromagnético quântico e misto ferrimagnético, QFO e MFI, são estáveis para valores moderados do campo magnético variando entre os campos críticos  $h_{c2} = J_1 + \frac{3J}{2}$  e  $3J_1$ , respectivamente, que representa um limite inferior para a surgimento do estado misto ferromagnético, MFO, com característica ferromagnética moderada.

Finalmente, para campos magnéticos maiores que o campo de saturação  $h_{c3} = 3J_1 + \frac{3J}{2}$  todos os spins são forçados a se alinharem na direção do campo externo, num estado de polarização total, representado pela fase CFO.

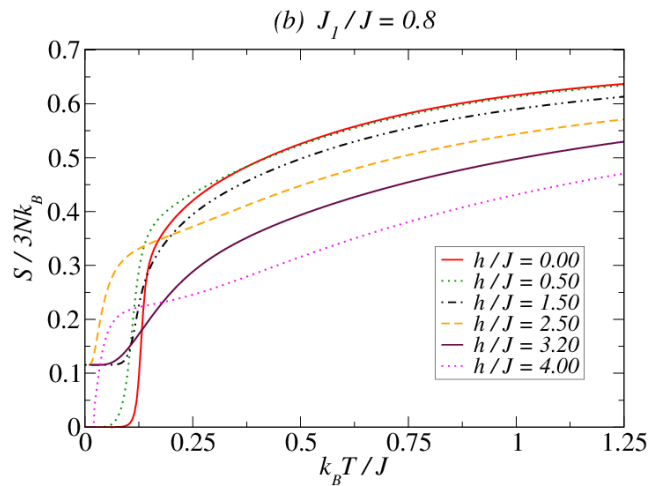
## Entropia

Para melhor caracterizar a influência do banho térmico sobre as características de ordenamento do modelo, foi criada a figura 6.9, que mostra a dependência da entropia em função da temperatura para dois valores da razão  $\frac{J_1}{J}$ , em duas regiões de parâmetros:  $\frac{J_1}{J} = 0.6$  (figura 6.9(a)) e  $\frac{J_1}{J} = 0.8$  (figura 6.9(b)), e para alguns valores do campo magnético.

Figura 6.9: Gráfico da entropia por spin em função da temperatura para alguns valores do campo magnético dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ .



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

Inicialmente, podemos comentar os valores residuais de entropia, que podem ser obtidos através da inspeção direta dos ordenamentos do autoestado do diagrama de fase, figura 6.2. Pode-se observar que as fases QAF e QFO têm a mesma entropia residual  $\frac{S}{Nk_B} = \ln 2$ , as fases intermediárias MFI e MFO têm entropia residual  $\frac{S}{Nk_B} = \frac{1}{2} \ln 2$  e on-

ornamento CFO tem entropia residual nula, por ser um estado completamente ordenado com o campo.

Na figura 6.9(a), cuja razão dos acoplamentos é ( $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ), abaixo do primeiro campo crítico,  $h_c^1 = 0.6$ , o sistema se encontra na estrutura do estado fundamental QAF, que possui entropia  $S = Nk_B \ln 2$ . Acima do primeiro campo crítico,  $h_c^1 = 0.6$ , o estado fundamental passa ser o QFO, com mesmo valor de entropia,  $S = Nk_B \ln 2$ , por possuir uma disposição dos spins semelhante. Com o aumento do campo magnético, para um valor acima do segundo campo crítico de transição  $h_c^2 = 2.1$ , o ordenamento MFO sobressai aos demais, com baixa entropia  $S = \frac{1}{2}Nk_B \ln 2$ . Finalmente, acima do terceiro (e último) valor de campo crítico de transição  $h_c^3 = 3.3$ , o ordenamento irá corresponder ao estado fundamental não degenerado CFO, sem entropia residual.

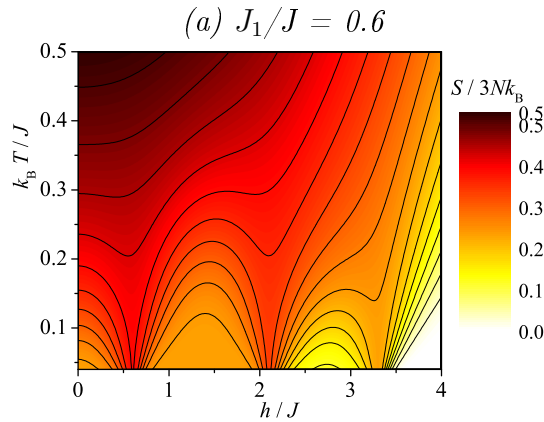
A figura 6.9(b) indica a região de acoplamentos: ( $\frac{J_1}{J} = 0.8$ ), onde é possível distinguir uma sequência de transições entre quatro fases também, devido a transição sucessiva entre os três campos de transição  $h_c = \{0.9, 2.4 \text{ e } 3.9\}$ , com o aumento do campo. Na região de baixos campos magnéticos, abaixo do primeiro campo de transição  $h_c^1 = 0.9$ , há a predominância da fase CAF, que não possui entropia residual por ser uma fase de ordenamento clássico. Acima do primeiro campo de transição e abaixo do terceiro campo de transição,  $h_c^3 = 3.9$ , que correspondem aos ordenamentos mistos (MFI e MFO), que têm metade das células unitárias quânticas e a outra metade clássicas, possuem entropias residuais iguais,  $S = \frac{1}{2}Nk_B \ln 2$ , que representa uma entropia média entre as células clássicas e quânticas que formam a fase. Dentro da região de campo externo intenso, acima de  $h_c^3$ , o sistema alcança a fase CFO, que é não degenerada, como a fase CAF para campos baixos.

### Desmagnetização adiabática

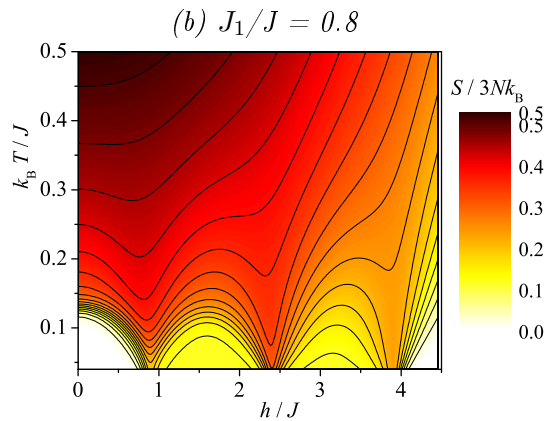
Conforme foi discutido no capítulo 1, a entropia de um sistema magnético é resultado das entropias de rede, eletrônica e magnética, sendo apenas esta última dependente do campo, pois este ordena os spins da rede diminuindo a entropia.

Assim, como o efeito magnetocalórico é resultado da variação do campo, apenas a entropia magnética está ligada a este efeito. Esta entropia é inversamente proporcional à força do campo e diretamente proporcional à temperatura. Desta forma, o efeito magnetocalórico consiste em duas transformações consecutivas: (i) uma transformação

Figura 6.10: Curvas isentrópicas no diagrama do campo magnético externo  $\frac{h}{J}$  em função da temperatura  $\frac{k_B T}{J}$  dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ .



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

isotérmica com o aumento do campo magnético e (ii) uma transformação adiabática com uma redução quase estática do campo magnético. A primeira transformação nos dá uma variação negativa da entropia magnética, já que o campo magnético reduz a desordem magnética do sistema.

Recentemente, foi mostrado que vários sistema de spins frustrados podem exibir um elevado efeito magnetocalórico durante a desmagnetização adiabática, um efeito que pode ter muitas aplicações práticas para a utilização em refrigeração magnética [192]. Então, iremos investigar a desmagnetização adiabática do modelo de tubo de spin- $\frac{1}{2}$  em condições adiabáticas.

Na figura 6.10, temos as curvas isentrópicas no diagrama do campo magnético externo  $\frac{h}{J}$  em função da temperatura  $\frac{k_B T}{J}$  dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ), em duas regiões de parâmetros:  $\frac{J_1}{J} = 0.6$  (figura 6.10(a)) e  $\frac{J_1}{J} = 0.8$  (figura 6.10(b)).

Dentro das figuras 6.10(b) e 6.10(a), as linhas escuras representam as curvas isentrópicas. Na região de baixos campos externos, vemos que as curvas isentrópicas tendem a se afunilar (representando um bom indicador de transição de fase nos diagramas), em baixas temperaturas, exatamente na sequência de três campos críticos que revelam as transições  $QAF \rightarrow QFO \rightarrow MFO \rightarrow CFO$ , como mostrado na figura 6.10(a), e a figura 6.10(b) mostra o outro caso particular, refletindo a outra sequência de campos de transições  $CAF \rightarrow MFI \rightarrow MFO \rightarrow CFO$ .

Através das curvas isentrópicas, podemos observar que com a diminuição do campo externo temos uma eficiente redução da temperatura do sistema, em regiões de campos finitos, próximos ao valor do primeiro campo de transição  $h_c^1$ . Entretanto, em ambos os casos, não há um efeito de resfriamento magnético eficiente (em campo nulo), o suficiente para que possamos conjecturar que compostos magnéticos com a estrutura magnética semelhante ao nosso modelo possam ter aplicações industriais relevantes.

### Calor Específico

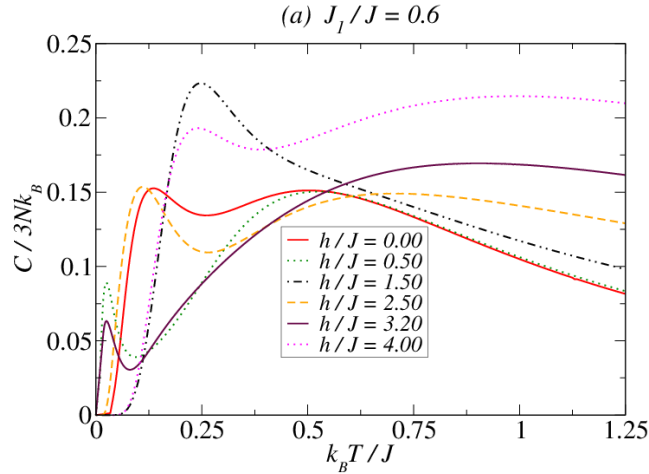
Para uma maior compreensão dos efeitos térmicos sobre o sistema, é importante analisar, também, a dependência do calor específico em função da temperatura e do campo magnético, em duas regiões de parâmetros:  $\frac{J_1}{J} = 0.6$  (figura 6.11(a)) e  $\frac{J_1}{J} = 0.8$  (figura 6.11(b)).

Em campo nulo, observando a figura 6.11(a), uma estrutura de duplo pico surge supõe-se devido a uma transição térmica introduzida entre os estados  $QAF \rightarrow QFO$ , que possuem entropias residuais semelhantes, assim explicaria o fato dos picos possuírem mesma altura. Entretanto esta estrutura de duplo pico é instável, e o segundo pico tenderá a mover-se em direção a temperaturas baixas com o aumento do campo magnético externo. Vale frisar que a evolução da estrutura de duplo pico, quando nos referimos ao calor específico, é um indicador da ocorrência de uma transição de fase no estado fundamental no modelo.

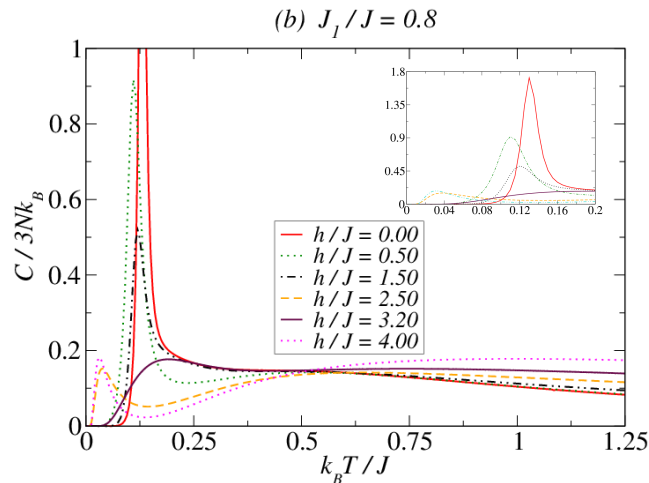
Posteriormente, o pico de baixa temperatura tornará-se cada vez menor, por conta das fases superiores (MFO e CFO) terem uma degenerescência menor que a fase QAF e QFO.

Na figura 6.11(b) é observado outro gráfico do calor específico do sistema, dentro da região de acoplamentos  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ . Como podemos ver, o comportamento em campo nulo é altamente degenerado, induzindo um pico do calor específico, chamando efeito

Figura 6.11: Gráfico do calor específico por spin em função da temperatura para alguns valores do campo magnético dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ .



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

Schottky [70], bastante ingreme devido a uma transição térmica induzida de um estado pouco degenerado (CAF) para um estado altamente degenerado (MFI).

A grande diferença entre as degenerescências do estado fundamental para as fases CAF e MFI, figura 6.11(b) gera uma variação abrupta na entropia do sistema dentro de curto valor de temperatura e, por consequência, um grande pico no calor específico do sistema. Com o aumento do campo magnético, o pico Schottky vai diminuindo, gradativamente, como no caso  $\frac{h}{J} = 1.5$ , em que o pico é aproximadamente  $\frac{1}{3}$  menor que o pico para campo nulo.

Posteriormente, surge uma estrutura de duplo pico, para valores de campo externo superiores ao segundo campo de transição  $h_c^2$ . Essa estrutura de duplo pico ocorre devido

a uma transição térmica induzida entre estados mistos igualmente degenerados, (MFO) e (MFI).

### Processos de magnetização

Agora, iremos examinar a dependência das curvas de magnetização do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg. De acordo com o teorema de Oshikawa-Yamanaka-Affleck (OYA) [23], o tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  pode exibir platôs de magnetização em zero, um terço e dois terço do valor de saturação da magnetização. Tal comportamento pode ser observado na Fig. 6.12, onde o tubo de spin- $\frac{1}{2}$  exibe todos os possíveis platôs de magnetização, previstos pelo teorema OYA.

Mais especificamente, os estados fundamentais antiferromagnéticos, QAF e CAF, são responsáveis pelo platô trivial com magnetização nula, os estados ferromagnético quântico e ferrimagnético, QFO e MFI, são referentes aos platôs intermediários localizados na região de um terço da magnetização de saturação e, finalmente, o estado fundamental misto ferromagnético, MFO, é responsável pelo aparecimento do platô de dois terços de magnetização de saturação.

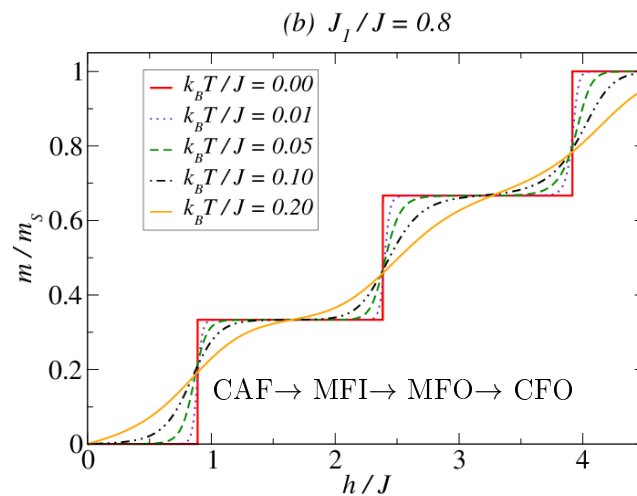
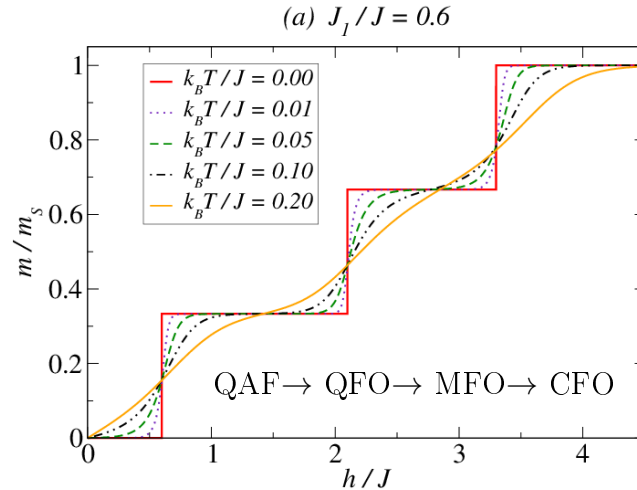
Então, os três platôs de magnetização estão sempre presentes nas curvas de temperatura nula. O mecanismo por trás do surgimento dos platôs depende, basicamente, da razão de interação seja maior ou menor que um valor específico de acoplamentos:  $\frac{J_1}{J}$ , ou seja, devido à frustração geométrica imposta. No sistema analisado, o acréscimo da agitação térmica destrói as características dos platôs, fazendo com que a magnetização local cresça continuamente com o aumento do campo externo.

Na região de acoplamentos  $\frac{J_1}{J} < \frac{3}{4}$ , o platô nulo e o platô um terço correspondem aos estados fundamentais QAF e QFO, como mostrado na figura 6.12(a), enquanto, na região  $\frac{J_1}{J} > \frac{3}{4}$ , o platô nulo e o platô um terço representam o sistema dentro das fases: CAF e MFI, como mostrado na figura 6.12(b).

Outro ponto é que as curvas de magnetização, para diferentes valores de temperatura, apresentam um ponto de encontro em comum num valor específico de magnetização, que pode ser mais alto ou mais baixo dependendo do valor da diferença da degenerescência dos estados que participam da transição.

Por exemplo, na transição entre fases, descrito na figura 6.12(a), com mesmo valor residual de entropia ( $QAF \rightarrow QFO$ ), o ponto de encontro da magnetização é aproxima-

Figura 6.12: Gráfico da magnetização normalizada com respeito ao valor de saturação em função do campo magnético dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ . Percebe-se, em ambos os casos, a presença dos platôs um terço e dois terços após as regiões de transição.



damente o valor intermediário da magnetização platô subsequente. Para as transições  $QFO \rightarrow MFO$  e  $MFO \rightarrow CFO$ , os pontos de encontro ocorrem abaixo do valor intermediário, pois são transições de uma fase mais degenerada para uma menos degenerada.

Na figura 6.12(b), o ponto de encontro das curvas de magnetização para a transição  $CAF \rightarrow MFI$  ocorre em um nível mais alto que na transição  $QAF \rightarrow QFO$ , pois é uma transição de uma fase com entropia residual nula para uma fase altamente degenerada, ou seja, o sistema está saindo da fase clássica, CAF, para uma fase mista degenerada, MFI, gerando um acentuado salto da magnetização. No caso da segunda transição, ( $QAF \rightarrow$



QFO), as duas fases possuem o mesmo grau de degenerescência, como mencionado o ponto de encontro será um valor intermediário do valor do salto de magnetização. O último ponto de encontro das curvas de magnetização representa transição  $MFO \rightarrow CFO$  ocorre em um nível mais baixo que na transição  $QAF \rightarrow QFO$ , pois é uma transição de uma fase com altamente degenerada para uma fase com entropia nula, ou melhor, o sistema está entrando da fase clássica, CFO, saindo uma fase mista degenerada, MFO.

### Funções de correlação

Outro método, para se ter uma visão mais profunda sobre as características do ordenamento magnético do sistema frente às variações do campo externo e temperatura, é explorar as funções de correlação entre os pares de spins primeiro vizinhos, descritas nas figuras 6.13 (para a correlações transversais,  $C_{xx}$ ) e 6.14 (para as correlações longitudinais,  $C_{zz}$ ).

Pode-se afirmar, de antemão, que os spins de diferentes células triangulares, acoplados pela interação de Ising,  $J_1$ , não possuem correlações entre suas componentes transversais,  $C_{zz}$ , pois esta interação é apenas entre as componentes  $z$  (longitudinais) dos pares de spins.

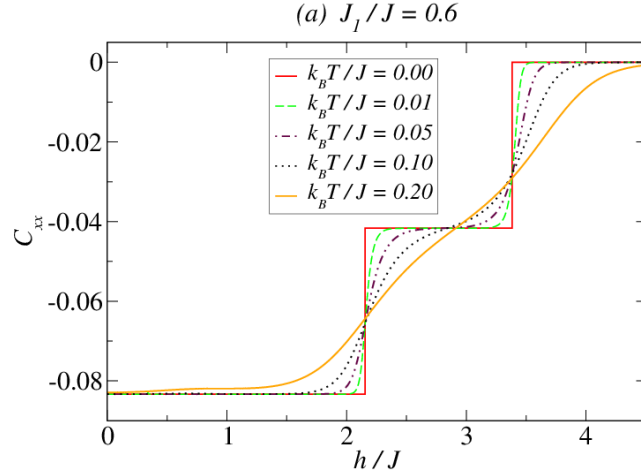
Como resultado disso, o modelo não apresentará correlações quânticas entre spins de células distintas. Contrariamente, correlações transversais ocorrem para as interações dentro de cada célula unitária, que podem estar correlacionados quanticamente dependendo da região de parâmetros considerados, devido ao caráter quântico dos acoplamentos,  $J$ .

As funções de correlação analisadas, figuras 6.13 ( $C_{xx}$ ) e 6.14 ( $C_{zz}$ ), estão graficadas em função do campo magnético para alguns valores da temperatura, dentro de duas regiões específicas do espaço de fase:  $\frac{J_1}{J} = 0.6$  e  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ .

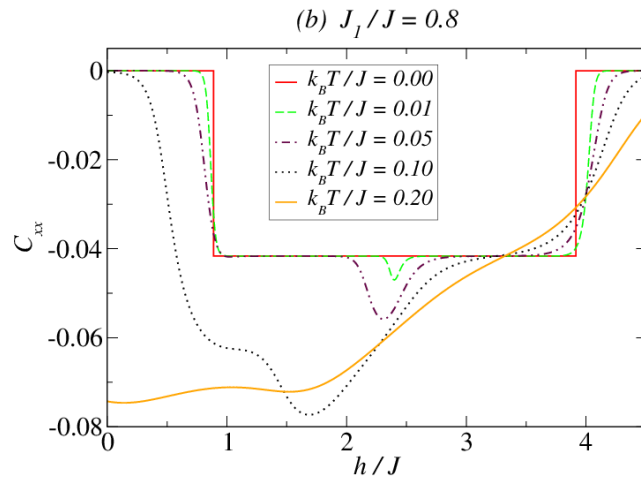
A correlação transversal,  $C_{xx}$ , para  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ , figura 6.13(a), mostra um platô duplo inicial, correspondente a  $C_{xx}|_{T=0} = -\frac{1}{12}$ , pois as duas fases QFO e QFA possuem ordenamentos de spin semelhantes. Além disso, mostra um platô intermediário, acima do campo de transição  $h_c^2 = 2.1$ , correspondendo a fase MFO com  $C_{xx}|_{T=0} = -\frac{1}{24}$ , enquanto a fase CFO não possui correlações transversais, por ser um ordenamento clássico de saturação com o campo externo. Os valores negativos das correlações transversais mostram o caráter antiferromagnético dos acoplamentos internos das células triangulares.

Para  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ , tem-se figura 6.13(b), há ainda um único platô intermediário com

Figura 6.13: Gráfico da correlação  $C_{xx}$  em função do campo magnético externo  $\frac{h}{J}$  para alguns valores da temperatura  $\frac{k_B T}{J}$  dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x = J_y = J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ .



Fonte: Autor, 2017.

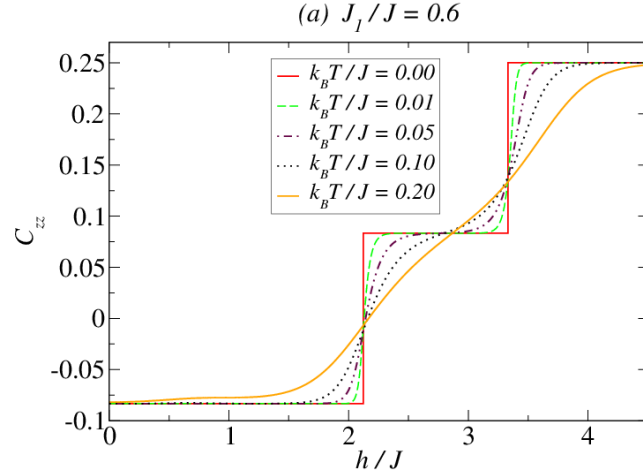


Fonte: Autor, 2017.

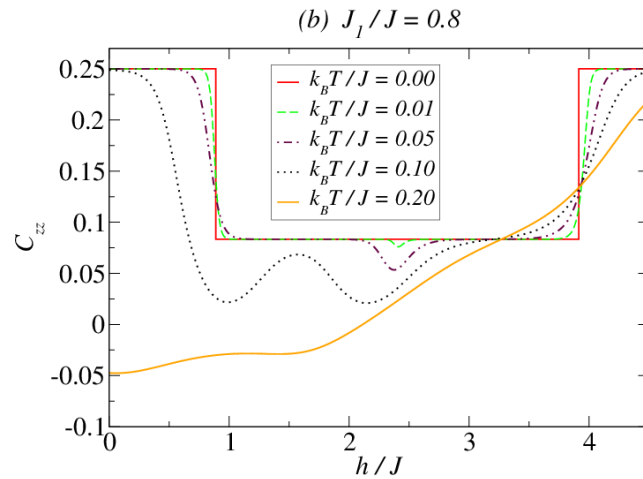
$C_{xx}|_{T=0} = -\frac{1}{24}$ , correspondente às fases MFI e MFO, entre os campos de transição  $h_c^1 = 0.9$  e  $h_c^3 = 3.9$ . Não há correlações transversais nos estados fundamentais clássicos CAF e CFO.

As excitações térmicas possuem um impacto diferente em cada um dos casos: 6.13(a) e 6.13(b). Porém no caso do estado quântico para  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ , figura 6.13(a), as pequenas excitações térmicas apenas atenuam os saltos das transições de fase. Outro ponto é que, assim como nas curvas de magnetização, as curvas de correlações de spins para diferentes valores de temperatura, apresentam um ponto de encontro em comum num valor específico de correlação, que pode ser mais alto ou mais baixo dependendo do valor da diferença da degenerescência dos estados que participam da transição.

Figura 6.14: Gráfico da correlação  $C_{zz}$  em função do campo magnético externo  $\frac{h}{J}$  para alguns valores da temperatura  $\frac{k_B T}{J}$  dentro de uma região de acoplamentos isotrópicos de Heisenberg ( $J_x=J_y=J$ ) e dois valores específicos para  $J_1/J$  ilustrados em: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ .



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

As correlações longitudinais,  $C_{zz}$ , para spins situados no interior dos triângulos de spin ligados por acoplamentos de Heisenberg, mostradas na figura 6.14, apresentam também propriedades interessantes. Primeiramente, elas são apenas saturadas nas fases clássicas (CFO e CAF)  $C_{zz}|_{T=0} = \frac{1}{4}$ . As fases quânticas (QAF e QFO) mostram uma tendência a um "anti-alinhamento" com  $C_{zz}|_{T=0} = \frac{-1}{12}$ , enquanto as fases mistas (MFI e MFO) possuem os mesmos valores para as correlações longitudinais:  $C_{zz}|_{T=0} = \frac{1}{6}$ , com tendência a um alinhamento ferromagneto.

A agitação térmica induz uma depressão exatamente sobre o campo de transição  $h_c^2$ , que representa excitações do sistema entre os quântico misto, MFI e MFO, promovendo uma inversão no valor das correlações longitudinais, para valores fracos do campo externo

$h$ , de ferromagnéticas para antiferromagnéticas para temperaturas altas, como mostrado na figura 6.14(b). Em todos os casos, os ordenamentos magnéticos descrevem no regime de altas temperaturas.

## 6.2 Tubo Triangular de Ising-Heisenberg a Campo Nulo.

### 6.2.1 Método

Para o caso particular do sistema na ausência de um campo externo, supondo  $h = 0$  na equação 6.32, o Hamiltoniano do modelo do tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg pode ser representado pela seguinte expressão:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \quad (6.32)$$

com  $\mathcal{H}_i$  definido pela equação 6.2.

Utilizando argumentos matemáticos análogos, pode-se mostrar que a matriz de transferência  $\mathbf{T}(T_i, T_i^z; T_{i+1}, T_{i+1}^z)$ , representada pela equação 6.33, ganha uma nova e menos complexa representação matricial:

$$\mathbf{T}(T_i, T_i^z; T_{i+1}, T_{i+1}^z) = \langle S_i S_i^z | e^{-\beta \hat{H}_i} | S_{i+1} S_{i+1}^z \rangle =$$

$$\begin{pmatrix} q^3 r^9 u^9 & q^5 r^5 u^3 & q^5 r^5 u^{-3} & q^3 r^9 u^{-9} & q^2 u^5 z^3 & q^2 r^5 u^{-3} & q^2 r^5 u^3 & q^2 r^5 u^{-3} \\ q^5 r^5 u^3 & q^7 r u & q^7 r u^{-1} & q^5 r^5 u^{-3} & q^4 r u & q^4 r u^{-1} & q^4 r u & q^4 r u^{-1} \\ q^5 r^5 u^{-3} & q^7 r u^{-1} & q^7 r u & q^5 r^5 u^3 & q^4 r u^{-1} & q^4 y z & q^4 y z^{-1} & q^4 y z \\ q^3 r^9 u^{-9} & q^5 r^5 u^{-3} & q^5 r^5 u^3 & q^3 r^9 u^9 & q^2 r^5 u^{-3} & q^2 r^5 u^3 & q^2 r^5 u^{-3} & q^2 r^5 u^3 \\ q^2 r^5 u^3 & q^4 r u & q^4 r u^{-1} & q^2 r^5 u^{-3} & q r u & q r u^{-1} & q r u & q r u^{-1} \\ q^2 r^5 u^{-3} & q^4 r u^{-1} & q^4 r u & q^2 r^5 u^3 & q r u^{-1} & q r u & q r u^{-1} & q r u \\ q^2 r^5 u^3 & q^4 r u & q^4 r u^{-1} & q^2 r^5 u^{-3} & q r u & q r u^{-1} & q r u & q r u^{-1} \\ q^2 r^5 u^{-3} & q^4 r u^{-1} & q^4 r u & q^2 r^5 u^3 & q r u^{-1} & q r u & q r u^{-1} & q r u \end{pmatrix}, \quad (6.33)$$

onde  $q$ ,  $r$  e  $u$  foram introduzidos para simplificar a notação da matriz de transferência, sendo  $q = e^{-\frac{\beta J_z}{4}}$ ,  $r = e^{-\frac{\beta J_x}{8}}$  e  $u = e^{-\frac{\beta J_1}{4}}$ .

Portanto, nos concentraremos, mais uma vez, em encontrar os autovalores referentes à diagonalização da matriz de transferência, pela resolução da equação secular:

$$\text{Det}\left(\mathbf{T}(T_i, T_i^z; T_{i+1}, T_{i+1}^z) - \mathcal{I}\lambda\right) = 0, \quad (6.34)$$

Utilizando, novamente, as propriedades dos determinantes [188], teremos que 4 dos 8 autovalores são nulos ( $\lambda_8 = \lambda_7 = \lambda_6 = \lambda_5 = 0$ ), pois a matriz de transferência, equação 6.33, possui algumas de suas colunas e linhas linearmente dependentes.

Então, podemos reduzir a matriz de transferência, equação 6.33, para uma matriz  $4 \times 2$  descrita por:

$$\text{Det} \begin{bmatrix} q^3 r^9 u^9 - \lambda & q^2 r^5 u^3 & q^2 r^5 u^{-3} s & q^3 r^9 u^{-9} \\ q^2 r^5 u^3 & qru - \frac{\lambda}{(q^6+2)} & qru^{-1} & q^2 r^5 u^{-3} \\ q^2 r^5 u^{-3} & qru^{-1} & qru - \frac{\lambda}{(q^6+2)} & q^2 r^5 u^3 \\ q^3 r^9 u^{-9} & q^2 r^5 u^{-3} & q^2 r^5 u^3 & q^3 r^9 u^9 - \lambda \end{bmatrix} = 0. \quad (6.35)$$

Após algumas manipulações algébricas, chega-se ao seguinte resultado para a equação secular:

$$(\lambda^2 - a\lambda + b)(\lambda^2 - c\lambda + d) = 0, \quad (6.36)$$

os 4 coeficientes,  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$ , são, respectivamente:

$$\begin{aligned} a &= qr \left[ q^2 r^8 (u^9 + u^{-9}) + (u + u^{-1})(2 + q^6) \right] \\ b &= q^4 r^{10} (2 + q^6) \left[ (u + u^{-1})(u^9 + u^{-9}) - (u^3 + u^{-3})^2 \right] \\ c &= qr \left[ q^2 r^8 (u^9 - u^{-9}) + (u - u^{-1})(2 + q^6) \right] \\ d &= q^4 r^{10} (2 + q^6) \left[ (u - u^{-1})(u^9 - u^{-9}) - (u^3 - u^{-3})^2 \right]. \end{aligned} \quad (6.37)$$

Os outros quatro autovalores não nulos podem ser encontrados através equação secular de quarto grau 6.36. Assim, torna-se fácil encontrar os quatro autovalores remanescentes da matriz de transferência usando as raízes da equação 6.36. Por uma rápida inspeção da equação 6.36, vê-se  $\lambda_4 = \lambda_2$  e  $\lambda_3 = \lambda_1$ . Para simplificar a notação dos autovalores, irá se

adotar a relação matemática  $(z^c + z^{-c}) = 2 \cosh\left(\frac{\beta c J_1}{4}\right)$ . Agora, tendo essas condições em mente, obtemos os autovalores não nulos da matriz transferência :

$$\begin{aligned}\lambda_{1(2)} &= q^3 r^9 \cosh\left(\frac{9\beta J_1}{4}\right) + qrQ \cosh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right) \pm \sqrt{D_1} \\ \lambda_{2(4)} &= q^3 r^9 \cosh\left(\frac{9\beta J_1}{4}\right) + qrQ \cosh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right) \pm \sqrt{D_2},\end{aligned}\quad (6.38)$$

onde foi definido  $Q = (2 + q^6)$ , bem como  $D_1$  e  $D_2$  são dados pelas expressões:

$$\begin{aligned}D_1 &= \left[ q^3 r^9 \cosh\left(\frac{9\beta J_1}{4}\right) - qrQ \cosh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right) \right]^2 + 4q^4 r^{10} Q \cosh^2\left(\frac{3\beta J_1}{4}\right) \\ D_2 &= \left[ q^3 r^9 \sinh\left(\frac{9\beta J_1}{4}\right) - qrQ \sinh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right) \right]^2 + 4q^4 r^{10} Q \sinh^2\left(\frac{3\beta J_1}{4}\right).\end{aligned}\quad (6.39)$$

No limite termodinâmico,  $N \rightarrow \infty$ , a energia livre de Helmholtz por célula unitária é determinada pelo maior autovalor entre as duas raízes da equação,  $\lambda_{max} = \max\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\}$ . Então,

$$f = -\beta^{-1} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = -\frac{3(2J_x + J_z)}{8} - \beta^{-1} \ln \lambda_1. \quad (6.40)$$

Substituindo o maior autovalor 6.38 na equação para a energia livre de Helmholtz 6.40, após de algumas manipulações algébricas da expressão, pode-se obter uma forma explícita para energia livre de Helmholtz do sistema:

$$f = -\beta^{-1} \ln (g_1 + g_2 + g_4), \quad (6.41)$$

que é expressa em termos de um novo conjunto de variáveis  $g_i$  definidas por:

$$\begin{aligned}g_1 &= \exp\left(-\frac{3\beta J_z}{4}\right) \cosh\left(\frac{9\beta J_1}{4}\right) \\ g_2 &= \exp\left[\frac{\beta}{4}(J_z + 2J_x)\right] \left[2 + \exp\left(-\frac{3\beta J_x}{2}\right)\right] \cosh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right) \\ g_3 &= \exp\left[\frac{\beta}{2}(J_z - J_x)\right] \left[2 + \exp\left(-\frac{3\beta J_x}{2}\right)\right] \cosh^2\left(\frac{3\beta J_1}{4}\right) \\ g_4 &= \sqrt{(g_1 - g_2)^2 + 4g_3}.\end{aligned}\quad (6.42)$$

A entropia por sítio pode ser facilmente obtida a partir da derivada da energia livre de Helmotz, equação 6.43, em função da temperatura do banho térmico  $T$ :

$$S = k_B \left[ \ln (g_1 + g_2 + g_4) + T \frac{\partial \ln (g_1 + g_2 + g_4)}{\partial T} \right], \quad (6.43)$$

Em seguida, iremos calcular as funções de correlações, através da derivada da energia livre de Helmholtz, equação 6.42, em função dos acoplamentos  $J_x$ ,  $J_z$  e  $J_1$ . Primeiramente, as correlações pertencentes a mesma célula unitária, acoplados pelas interações de Heisenberg,  $J_x$  e  $J_z$ , definidas pelas expressões:

$$C_{11}^{ZZ} = \frac{1}{Z} \mathbf{Tr} \left[ \left( \hat{S}_{j,i}^z \hat{S}_{j+1,i}^z \right) e^{-\beta \hat{H}} \right] = \frac{(g_1 - g_2) \left( g_1 + \frac{g_2}{3} \right) + \frac{4g_3}{3} + \left( g_1 - \frac{g_2}{3} \right) g_4}{4 \left[ (g_1 - g_2)^2 + 4g_3 + (g_1 + g_2) g_4 \right]} \quad (6.44)$$

$$C_{11}^{XX} = \frac{1}{Z} \mathbf{Tr} \left[ \left( \hat{S}_{j,i}^x \hat{S}_{j+1,i}^x \right) e^{-\beta \hat{H}} \right] = \frac{1}{6} \frac{g_5 (g_1 - g_2) - 2g_6 - g_4 g_5}{(g_1 - g_2)^2 + 4g_3 + (g_1 + g_2) g_4}, \quad (6.45)$$

que contém dois novos parâmetros  $g_5$  e  $g_6$  dados por

$$g_5 = \exp \left[ \frac{\beta}{4} (J_z + 2J_x) \right] \left[ 1 - \exp \left( -\frac{3\beta J_x}{2} \right) \right] \cosh \left( \frac{\beta J_1}{4} \right) \quad (6.46)$$

$$g_6 = \exp \left[ \frac{\beta}{2} (J_z - J_x) \right] \left[ 1 - \exp \left( -\frac{3\beta J_x}{2} \right) \right] \cosh^2 \left( \frac{3\beta J_1}{4} \right). \quad (6.47)$$

A correlação referente ao par de spins que estão em diferentes células unitárias, integrando através das ligações de Ising  $J_1$ , é representado por:

$$C_{1,2}^{ZZ} = \frac{1}{Z} \mathbf{Tr} \left( \hat{S}_{j,i}^z \hat{S}_{j,i+1}^z \right) e^{-\beta \hat{H}} = -\frac{1}{4} \frac{(g_1 - g_2) \left( g_7 + \frac{g_2}{3} \right) + \frac{g_9}{3} + \left( g_7 + \frac{g_8}{3} \right) g_4}{(g_1 - g_2)^2 + 4g_3 + (g_1 + g_2) g_4}, \quad (6.48)$$

onde nessa expressão também foi introduzido um novo conjunto de parâmetros:

$$\begin{aligned} g_7 &= \exp \left( \frac{-3J_z \beta}{4} \right) \sinh \left( \frac{9\beta J_1}{4} \right), \\ g_8 &= \exp \left[ \frac{\beta}{4} (J_z + 2J_x) \right] \left[ 2 + \exp \left( -\frac{3\beta J_x}{2} \right) \right] \sinh \left( \frac{\beta J_1}{4} \right), \\ g_9 &= \exp \left[ \frac{\beta}{2} (J_x - J_z) \right] \left[ 2 + \exp \left( -\frac{3\beta J_x}{2} \right) \right] \sinh \left( \frac{3\beta J_1}{2} \right). \end{aligned} \quad (6.49)$$

Se faz importante estudar também se esse sistema de muitos corpos é capaz de mostrar o emaranhamento, e qual comportamento das correlações quânticas frente à variação de

temperatura. Bem como verificar se o emaranhamento pode ser usado como parâmetro de ordem para transições de fase quânticas.

Então, após o cálculo das correlações de pares acima, podemos obter relações para a concorrência (C), equação 3.107, e para a função de Bell (B) [200], que servem como medidas de emaranhamento quântico e não-localidade bipartida, respectivamente, dadas por:

$$C = \max \left\{ 0; 4 \left| C_{xx} \right| - 2 \sqrt{\left( \frac{1}{4} + C_{zz} \right)^2 - m^2} \right\} \quad (6.50)$$

e

$$B = \max \left\{ 8 \sqrt{C_{xx}^2 + C_{zz}^2}; 8 \sqrt{2C_{xx}^2} \right\}. \quad (6.51)$$

Haverá emaranhamento quântico se a concorrência C for maior que zero, de outro modo os estados serão separáveis. Por outro lado, se houver a violação da inequação de Bell,  $B \leq 2$ . Isto pode ser usando para caracterizar a não-localidade das correlações quânticas.

Para uma análise completa do emaranhamento térmico, iremos reportar essas duas quantidades, C e B, pois elas capturam independentes características das correlações quânticas.

## 6.2.2 Resultados e Discussões

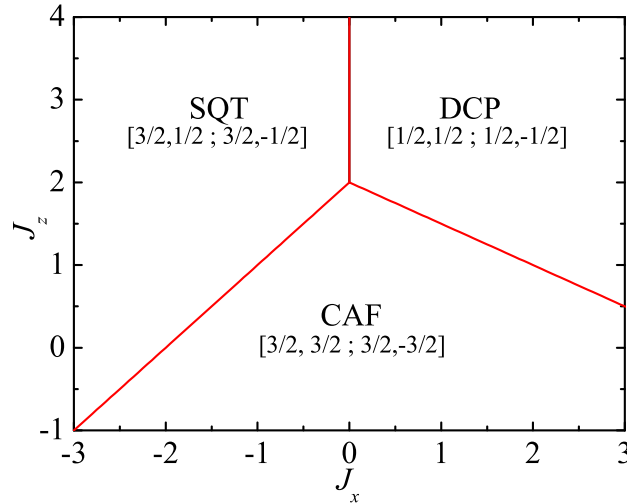
### Diagrama de Fase

Como se pôde observar, a partir deste ponto, iremos nos concentrar nos resultados do modelo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg para o caso de campo nulo,  $h = 0$ . As interações de Ising serão mantidas antiferromagnéticas,  $J_1 > 0$ , forçando um alinhamento antiferromagnético entre os spins situados em diferentes células unitárias.

A forma diagonal do Hamiltoniano, descrito pela equação 6.6, pode ser usada diretamente para se obter todos os possíveis estados fundamentais, mesmo procedimento utilizado para o caso com campo. Os estados de menor energia das células unitárias unitárias adjacentes podem ser visto como extensões dos estados fundamentais do sistema



Figura 6.15: O diagrama do estado fundamental do modelo do tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg no plano  $J_x - J_z$ . Os números escritos dentro dos colchetes representam o spin total e a componente  $z$  em duas células unitárias consecutivas  $[T_{2i-1}, T_{2i-1}^z; T_{2i}, T_{2i}^z]$ .



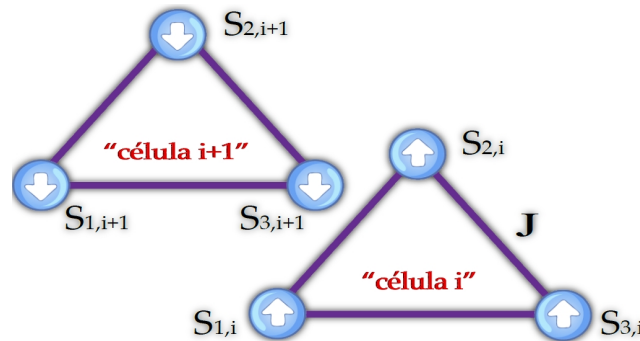
Fonte: Autor, 2017.

geral.

Consequentemente, o estado fundamental desta rede triangular de spins pode ser escrito como um produto tensorial sobre todos os estados de menor energia das células triangulares. Desta forma, o sistema na ausência de um campo magnético externo apresenta apenas 3 estados fundamentais diferentes:

- **A fase antiferromagnética clássica (CAF):**

Figura 6.16: Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento antiferromagnético clássico.

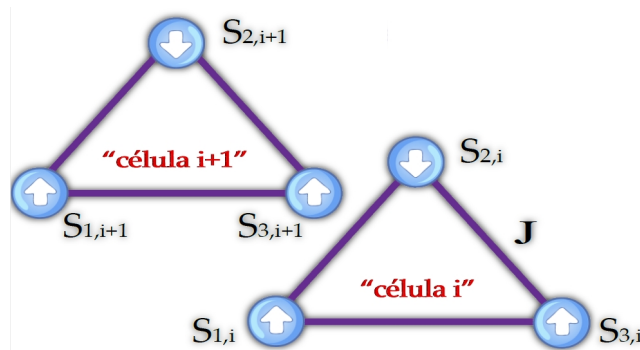


Fonte: Autor, 2017.

$$|\text{CAF}\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j-1} \otimes |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle_{2j-1} \otimes |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j} \end{cases}, \quad (6.52)$$

- Fase simétrica trimerizada quântica (STQ):

Figura 6.17: Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento simétrico trimerizado quântico.



Fonte: Autor, 2017.

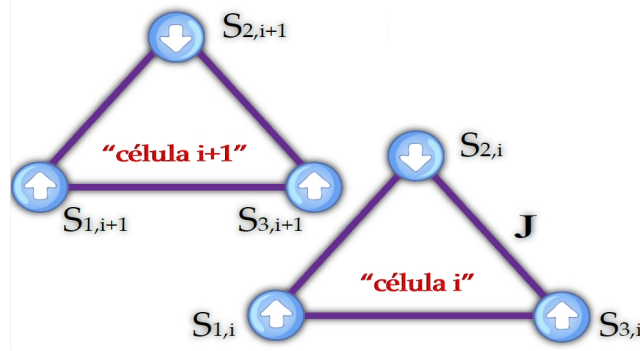
$$|\text{STQ}\rangle = \prod_{j=1}^{\frac{N}{2}} \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \right)_{2j-1} \otimes \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right)_{2j}, \quad (6.53)$$

- Fase antiferromagnética quântica (DCP) :

$$|\text{QAF}\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j-1} \otimes \left| -\frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} \left| -\frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j-1} \otimes \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j} \end{cases}, \quad (6.54)$$

Acima, foi novamente introduzido, a fim de facilitar a notação, os mesmos autovetores já definidos no caso do modelo a campo não nulo, equação 6.30,  $|\pm 1/2, R\rangle_j$  e  $|\pm 1/2, L\rangle_j$ .

Figura 6.18: Diagrama representando duas células triangulares consecutivas dentro do ordenamento antiferromagnético quântico.



Fonte: Autor, 2017.

Um ponto crucial, para discussão do modelo do tubo de spins na ausência do campo, é que temos uma nova fase simétrica trimerizada quântica (SQT), que não aparece em nossa análise anterior, para modelo sob a influência do campo magnético. A fase DCP representa a mesma fase QAF, descrita no modelo do tubo de Ising-Heisenberg com o campo magnético externo. As sigla DCP, SQT e CAF foram escolhidas para facilitar a comparação com os resultados já obtidos na literatura [36].

As fases CAF e SQT são duplamente degeneradas, em contraste com a fase DCP que é  $2 \times 2^N$  degenerada devido ao fato da simetria de reversão dos spins e pela duplo grau de quiralidade em cada uma das células unitárias triangulares. O alinhamento de spins inerente a esses estados fundamentais podem ser considerados com valores assintóticos para as funções de correlação 6.44, 6.45 e 6.48:

- **CAF:**  $C_{11}^{XX} = 0$ ,  $C_{11}^{ZZ} = \frac{1}{4}$  e  $C_{12}^{ZZ} = -\frac{1}{4}$ ;
- **SQT:**  $C_{11}^{XX} = \frac{1}{6}$ ,  $C_{11}^{ZZ} = -\frac{1}{12}$  e  $C_{12}^{ZZ} = -\frac{1}{36}$ ;
- **DPC:**  $C_{11}^{XX} = -\frac{1}{12}$ ,  $C_{11}^{ZZ} = -\frac{1}{12}$  e  $C_{12}^{ZZ} = -\frac{1}{36}$ .

O digrama de fase é descrito pela figura 6.15. A fase CAF torna-se o estado fundamental quando o sistema se encontra dentro da região  $J_z < 2 + J_x$  e  $J_z < 2 - \frac{J_x}{2}$ , que são consistentes com as ligações de Heisenberg ferromagnéticas ( $J_z < 0$ ) ou interações suficientemente fracas ( $J_z < 2$ ).

Se as condições  $J_x > 0$  e  $J_z > 2 - \frac{J_x}{2}$  são alcançadas, as frustrações nos alinhamentos de spin irão surgir a medida que os acoplamentos antiferromagnéticos de Heisenberg aumentam. Isto cria uma degenerescência macroscópica do estado fundamental DCP com

dois graus de liberdade devido as quiralidades (à esquerda e à direita) em cada triângulo. Quando o sistema satisfaz as condições:  $J_x < 0$  e  $J_z > 2 + J_x$ , o estado SQT com uma alternância regular da superposição quântica simétrica de 3 estados "up-up-down" e "down-down-up" nos triângulos ímpares e pares torna-se o estado fundamental.

### Funções de Correlação

Para termos um entendimento melhor do alinhamento dos spins na rede devido a variações nos acoplamentos e na temperatura, iremos explorar em detalhes a dependência das correlações, 6.44, 6.45 e 6.48, em relação a temperatura do sistema.

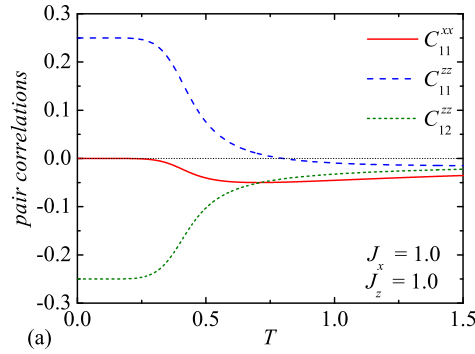
As funções de correlação de pares são plotadas em função da temperatura do sistema, ilustradas na figura 6.19, para 3 conjuntos de parâmetros diferentes, que leva a investigação do sistema através dos 3 estados fundamentais presentes no modelo.

Na figura 6.19(a) é ilustrado o comportamento as componentes  $z$  dos spins (linha verde tracejada) dentro da fase CAF, em diferentes células unitárias são perfeitamente anticorrelacionados em temperatura zero, onde a intensidade relativa das correlações antiferromagnéticas decresce com o aumento da temperatura. Um efeito interessante, presente nesta análise da fase CAF, é a correlação longitudinal para spins situados na mesma célula unitária (linha azul tracejada),  $C_{11}^{zz}$ , mostrar uma mudança peculiar de sinal em uma temperatura chamada **temperatura de frustração**,  $T_f$ , que faz com que as componentes longitudinais dos spins tornem-se completamente descorrelacionados,  $C_{11}^{zz} = 0$ . Podemos concluir, também, que a componente  $z$  dos spins são ferromagneticamente correlacionados acima da temperatura de frustração.

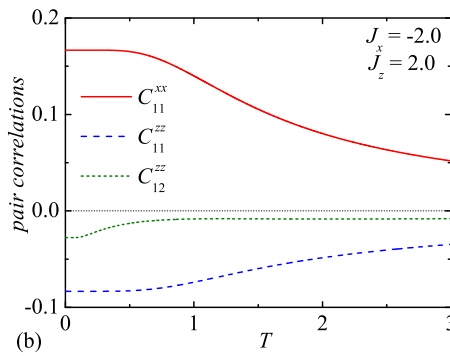
A linha contínua vermelha representa a função de correlação transversa (entre spins dentro da mesma célula unitária) é descorrelacionada em baixas temperaturas,  $C_{11}^{xx} = 0$ , devido à característica clássica da fase CAF, mas com a introdução da agitação térmica os spins passam a ser anticorrelacionados, como ilustrado na figura 6.19(a).

A figura 6.19(b) demonstra a variação térmica das funções de correlação, que possuem o comportamento típico da fase SQT. A função de correlação entre spins para o mesmo triângulo de Heisenberg, linha tracejada azul (linha contínua vermelha), serve como evidência das correlações antiferromagnéticas (ferromagnéticas) na direção longitudinal (transversal), onde a intensidade relativa da correlação ferromagnética é mais forte que a correlação longitudinal antiferromagnética. A correlação  $C_{12}^{zz}$  entre spins situados

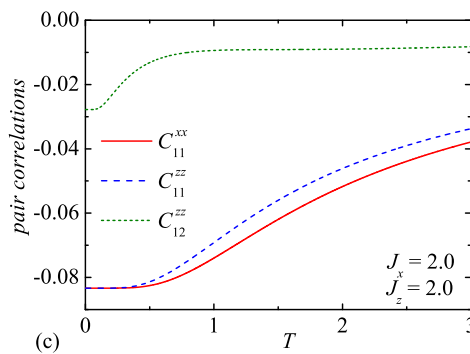
Figura 6.19: Funções de correlação de pares em função da temperatura para o conjunto de parâmetros  $(J_z, J_x)$  constante representando em cada figura uma das três fases do estado fundamental: (a)  $J_x = 1, J_z = 1$  (fase CAF), (b)  $J_x = -2, J_z = 2$  (fase SQT) e (c)  $J_x = 2, J_z = 2$  (fase DCP)



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

em triângulos vizinhos (linha tracejada verde) mostra-se antiferromagnética dentro da fase SQT.

Finalmente, as curvas plotadas em 6.19(c) representa a típica dependência com a temperatura das funções de correlação dentro da fase DCP. Como se pode ver, a correlação

longitudinal (linha tracejada azul) e transversal (linha contínua vermelha) para os spins dentro do mesmo triângulo são antiferromagnéticas. Apesar das correlações serem iguais em baixa temperatura, a correlação de pares transversa supera a outra para temperaturas não nulas. Além disso, a correlação entre os spins de triângulos vizinhos (linha tracejada verde) é sempre antiferromagnética, quando o sistema é investigado dentro do alinhamento DCP.

### Frustração Geométrica

Torna-se claro que as fases SQT e DCP possuem frustração geométrica, em contraste com o comportamento de baixa temperatura do estado não frustrado CAF, entretanto acontecerá frustração geométrica dentro da região de parâmetros da fase CAF com a ação da agitação térmica sobre os spins, acima de uma temperatura frustração  $T_f$ .

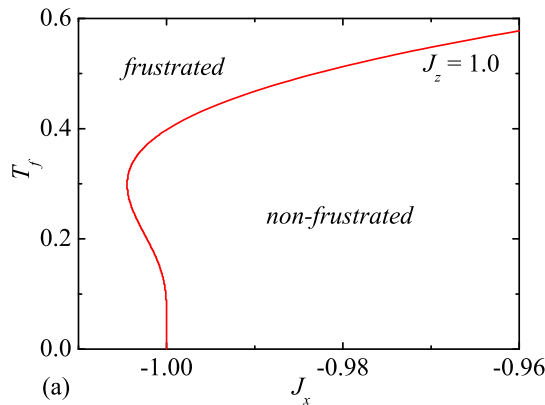
O conceito de frustração foi introduzido por Toulouse [27], como discutido no capítulo introdutório desta tese: o sistema de spin é dito geometricamente frustrado quando o produto dos sinais dos acoplamentos dentro da célula unitária é negativo. Analogamente, o produto dos sinais das funções de correlação, dentro da célula triangular para este modelo, também é um critério para caracterizar a frustração neste modelo.

Como a função de correlação  $C_{11}^{zz}$  é antiferromagnética (negativa), isto caracteriza a frustração dentro das fases SQT e DCP para a temperatura não nula [figuras 6.19(b) e (c)]. Por outro lado, as correlações longitudinais, entre os spins do mesmo triângulo para a fase CAF, mostradas na figura 6.19(a), mudam de sinal de positivas (para baixas temperaturas) para negativas (em altas temperaturas), que confirma um incremento da frustração de spins com o aumento da temperatura dentro da fase não frustrada CAF, assumindo que o acoplamento  $J_z$  dentro dos triângulos de Heisenberg seja antiferromagnético,  $J_z > 0$ .

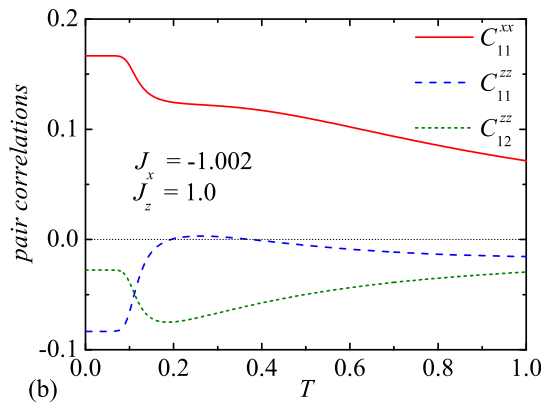
É importante mencionar que as componentes  $z$  dos spins pertencentes a mesma célula unitária (linha tracejada azul), estão correlacionadas ferromagneticamente (antiferromagneticamente) abaixo (acima) da temperatura de frustração  $T_f$ , como ilustrado na figura 6.19(a). Com isso, o modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg é livre de frustração dentro da região interna abaixo da linha de temperaturas de frustração, sendo frustrado fora dessa região, como pode ser visto na figura 6.20.

É evidente pela figura 6.21 que a região não frustrada gradualmente desaparece com o

Figura 6.20: (a) O comportamento reentrante da temperatura de frustração  $T_f$  nas vizinhanças da região de transição das fases CAF-SQT para o caso particular de  $J_z = 1$ . (b) Dependência da função de correlação com a temperatura para o conjunto de parâmetros ( $J_z = 1.0$ ,  $J_x = -1.002$ ) usados para confirmar o comportamento das correlações na região reentrância de  $T_f$  (uma fina linha horizontal foi colocada sobre o valor nulo apenas como guia para a observação).



Fonte: Autor, 2017.

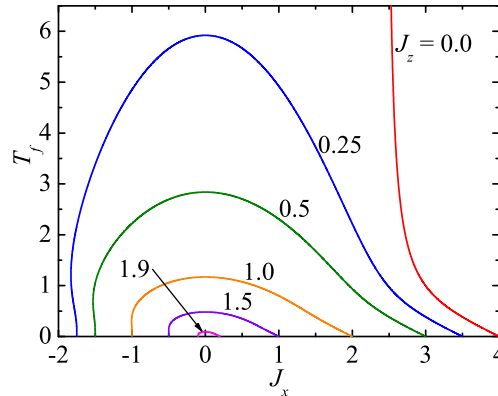


Fonte: Autor, 2017.

aumento da componente longitudinal  $J_z$  e desaparece totalmente quando  $J_z \geq 2$ . Isto está de acordo com a ausência de emaranhamento na fase CAF que é não frustrada, quando o sistema está na região  $J_z \geq 2$ . Também pode-se comentar que os limites laterais estão de acordo com as fronteiras de transição entre as fases FAC e DCP e a fronteira entre CAF e SQT, respectivamente 6.15.

Outro ponto interessante a ser observado, nas figuras 6.21 e 6.20, é que a temperatura de frustração exibe um notável comportamento reentrante próximo a parte inferior da região que apresenta a região de transição entre as fases CAF e SQT. Para esclarecer essa afirmação, vamos observar o comportamento das funções de correlação que é apresentado

Figura 6.21: Temperatura de frustração  $T_f$  como função da componente transversal do acoplamento de Heisenberg  $J_x$  para alguns valores específicos da componente longitudinal  $J_z$ .



Fonte: Autor, 2017.

na figura 6.20. Esta mostra uma dependência típica da temperatura de frustração nas proximidades da transição existente no estado fundamental, como ilustrado na fig. 6.20(a), e o correspondente comportamento das funções de correlação nessa região, descrito na fig. 6.20(b).

Se a componente transversal da interação de Heisenberg é selecionada suficientemente próxima mas um pouco acima da região de contorno,  $CAF \rightarrow SQT$ , então, a componente longitudinal da função de correlação entre spins da mesma célula unitária mostra uma correlação ferromagnética fraca dentro de um intervalo relativamente pequeno de temperatura e antiferromagnética para as demais temperaturas, como mostrado na figura 6.20.

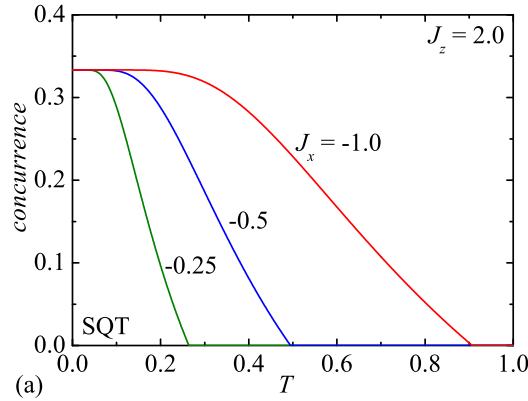
A partir deste ponto, torna-se importante investigar como o emaranhamento térmico faz surgir a frustração de spin sobre da fase não frustrada CAF depende do valor do acoplamento de Heisenberg considerado. Com esse intuito, a figura 6.21 mostra a dependência típica com a temperatura de frustração,  $T_f$ , na componente transversal  $J_x$  dos acoplamento de Heisenberg para alguns valores fixos da componente longitudinal  $J_z$ .

### Emaranhamento Quântico

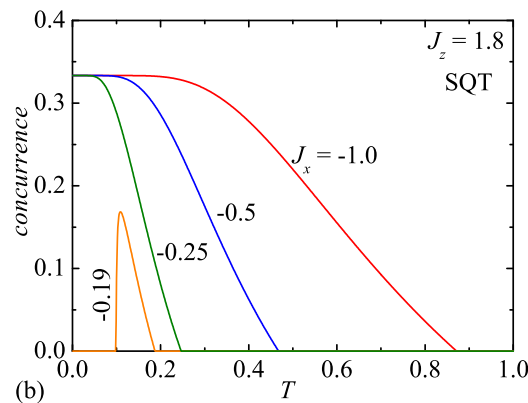
A concorrência, calculada pela equação 3.107, representa a caracterização do emaranhamento quântico para nosso modelo. A ausência de correlações quânticas na fase CAF pode ser antecipada com base na forma clássica dessa fase 6.52. Entretanto, é de uma



Figura 6.22: Dependência térmica da Concorrência em função da componente transversal do acoplamento de Heisenberg  $J_x$  para alguns valores específicos da componente  $J_z$ : (a)  $J_z = 2.0$ ; (b)  $J_z = 1.8$ .



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

certa surpresa que a concorrência seja nula também dentro da fase DCP (equação 6.54). Concluimos, então, que a fase SQT é a única fase que irá apresentar emaranhamento quântico.

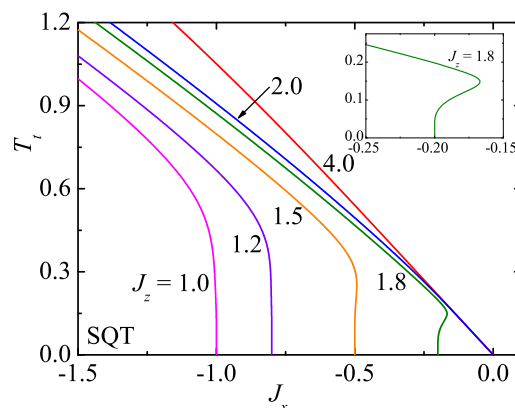
Em temperatura zero, é fácil de se obter  $\mathcal{C} = \frac{1}{3}$  através dos autovetor (equação 6.53) que representam o estado SQT, indicando um emaranhamento substancial, mas não completo dos estados de spin. Para esclarecer o efeito da temperatura sobre o emaranhamento bipartido, foi proposta a ilustração 6.22(a), representando a concorrência em função da temperatura para o acoplamento longitudinal  $J_z = 2$  do triângulo de Heisenberg e vários valores da componentes transversa  $J_x$ . Quando o acoplamento transversal tende a valores positivos,  $J_x \rightarrow J_x \geq 0$ , o sistema entra gradativamente na fase DCP e o emaranhamento desaparece.

De acordo com a expectativa, as flutuações térmicas gradualmente eliminam as correlações quânticas, fazendo com que a concorrência geralmente decresça com o aumento da temperatura até o ponto que desapareça por completo numa **temperatura limiar**,  $T_t$ .

Além desse comportamento tradicional, também foi encontrado um comportamento reentrante para a função  $\mathcal{C}(J_x, J_z)$ , que foi ilustrado num exemplo particular, figura 6.22(b), para o conjunto de parâmetros  $J_z = 1.8$  e  $J_x = -0.19$ . Sobre essas circunstâncias, a concorrência inicia do zero e apenas surge a partir de uma temperatura um pouco menor que  $T_t$ . Neste caso, o emaranhamento quântico mostra uma indução térmica peculiar crescendo e decrescendo até completamente sumir em  $T_t$ .

### Temperatura de Frustração e Temperatura Limiar

Figura 6.23: Temperatura limiar  $T_t$  como função da componente transversal do acoplamento de Heisenberg  $J_x$  para alguns valores específicos da componente  $J_z$ . O zoom mostra, em detalhes, a região de reentrância para o caso particular  $J_z = 1.8$ .



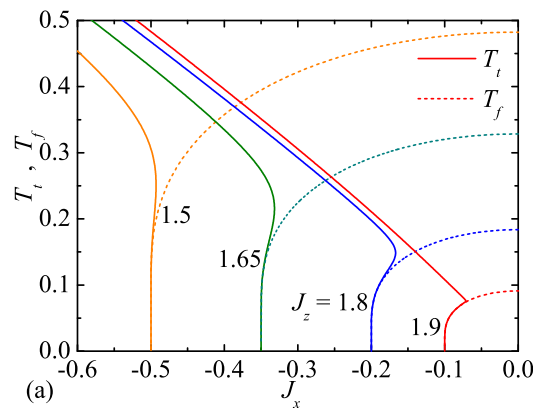
Fonte: Autor, 2017.

Para se obter uma idéia geral sobre a presença de emaranhamento e a relação disto com a frustração geométrica, a figura 6.23 mostra também a temperatura de frustração ( $T_f$ ) como função da interação de Heisenberg  $J_x$  para alguns valores do acoplamento  $J_z$ . Assim como o modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg será emaranhado dentro do espaço de parâmetros interior contornado pelas linhas da temperatura limiar ( $T_t$ ), onde a concorrência é não nula.

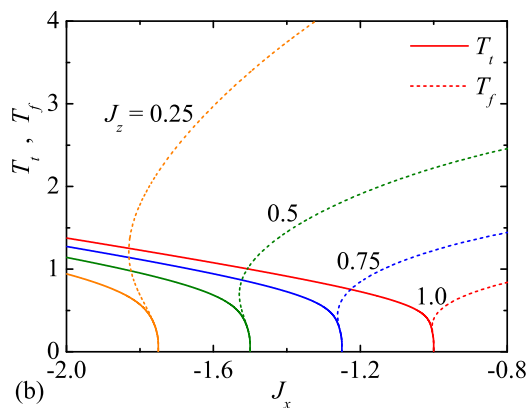
Se a interação de Heisenberg longitudinal é suficientemente alta  $J_z \geq 2$ , então, a temperatura limiar decresce monotonicamente com o crescimento da componente transversal  $J_x$  até tender a zero quando  $J_x = 0$ . Por outro lado, a dependência da temperatura limiar

acaba quando  $J_z < 2$ , ou seja, na região de fronteira entre as fases SQT-CAF,  $J_x = J_z - 2$ . Além disso, o comportamento reentrante mais proeminente pode ser observado na figura 6.23 quando estamos bem próximos inferiormente de  $J_z \approx 2$ .

Figura 6.24: Dependência da temperatura limiar  $T_t$  (linhas sólidas) e da temperatura de frustração  $T_f$  (linhas pontilhadas) em função da componente transversal  $J_x$  para diversos valores da componente longitudinal  $J_z$ . A figura (a) mostra o comportamento reentrante da temperatura limiar  $T_t$  e a figura (b) o comportamento reentrante da temperatura de frustração  $T_f$ .



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

Neste ponto, é de grande interesse verificar o comportamento conjunto entre a frustração dos spins e o emaranhamento quântico, que em primeiro momento não mostra nenhuma relação direta. Para verificar esse efeito conjunto, temos a figura 6.24, que representa a temperatura limiar e a temperatura de frustração em função do acoplamento de Heisenberg transversal  $J_x$  para alguns valores do acoplamento longitudinal  $J_z$  constante.

Para iniciarmos a comparação, pode-se notar que as temperaturas,  $T_t$  e  $T_f$ , coincidem em baixas temperaturas, pois ambas convergem para o mesmo limite de temperatura zero,

mesmo apresentando um comportamento totalmente independente em temperaturas mais altas.

Pode ser, também, entendido (a partir da figura 6.24) que o emaranhamento térmico ocorre apenas fora da região contornada pela linha das temperaturas de frustração. Isto significa que a frustração dos spins no modelo de spin- $\frac{1}{2}$  do tubo triangular de Ising-Heisenberg é essencial para o surgimento do emaranhamento quântico.

O comportamento reentrante nas temperaturas limiares ( $T_t$ ) indica o surgimento de emaranhamento quântico termicamente induzido na região de parâmetros para o qual o estado fundamental é não-frustrado  $J_z \approx 2$  (mostrado na figura 6.24(a)). A reentrância na temperatura de frustração indica que é possível atingir correlações não-frustradas na região de estado fundamental emaranhado (mostrado na figura 6.24(b)).

Outro ponto interessante é que ambas as reentrâncias são antagônicas e não podem emergir simultaneamente.

### Não-Localidade

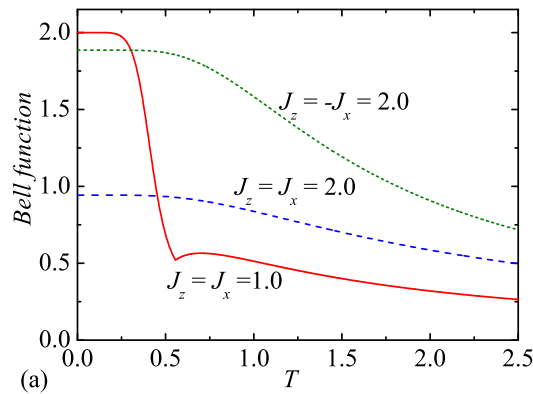
Outro ponto importante no estudo das correlações quânticas é se o modelo proposto viola ou não a desigualdade de Bell [200], pois o emaranhamento e a não-localidade carregam características independentes das correlações quânticas.

A verificação da validade da desigualdade de Bell para os três estados fundamentais revela que não há violação, desde que os valores obtidos nunca excedem o valor  $\mathcal{B} = 2$  permitido para correlações clássicas. Para comprovar essa afirmação basta observar o comportamento da função de Bell em função da temperatura, demonstrada na figura 6.25(a). Esta mostra as variações da função de Bell em cada uma dos três estados fundamentais que formam o diagrama de fase (figura 6.15): DCP (linha azul tracejada), CAF (linha vermelha contínua) e SQT (linha verde tracejada).

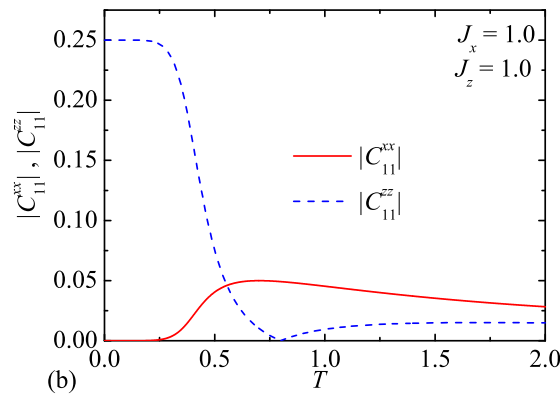
Desta forma, foi verificado que as correlações quânticas neste modelo de Ising-Heisenberg do tubo triangular apenas evidenciam a presença de emaranhamento quântico na fase SQT, mas não implicam em comportamentos não-locais na troca de informação entre os spins, resultado ilustrado na figura 6.25(a).

A cúspide presente na função de Bell para a temperatura  $T \approx 0.55$ , figura 6.25(a), é um caso particular da fase CAF representando o comportamento mais exótico observado. A presença deste tipo de singularidade deve-se ao fato que o valor absoluto das correlações

Figura 6.25: (a) Função de Bell em função da temperatura para 3 conjuntos diferentes de parâmetros de Heisenberg ( $J_z, J_x$ ) correspondendo aos 3 estados fundamentais disponíveis: ( $J_z = J_x = 1.0$ ) dentro da fase FAC, ( $J_z = -J_x = 2.0$ ) dentro da fase SQT e ( $J_z = J_x = 2.0$ ) dentro da fase DAQ. (b) Variação térmica do valor absoluto das correlações longitudinais e transversais para a mesma célula unitária quando estamos dentro da fase FAC ( $J_z = J_x = 1.0$ ) .



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

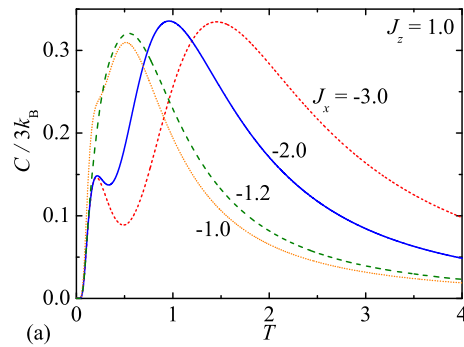
transversais e longitudinais entre os spins de uma mesma célula unitária se cruzarem nesse ponto, apresentando dois comportamentos distintos antes e depois do cruzamento, figura 6.25(b).

### Calor Específico

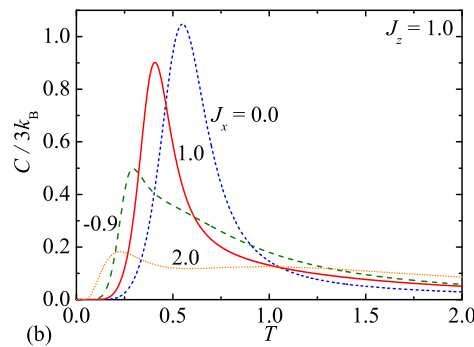
A variações substanciais das funções de correlação próximas às fronteiras de transição entre os estados fundamentais que formam o diagrama de fase (figura 6.15) indicam que existem também comportamentos não usuais nas demais quantidades termodinâmicas. Por fim, iremos analisar o comportamento do calor específico devido a variações térmicas

na ausência de campo externo.

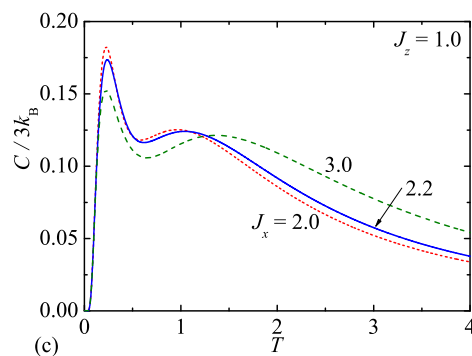
Figura 6.26: Calor específico por spin em função da temperatura para um valor específico do acoplamento longitudinal  $J_z = 1$  e alguns valores da componente transversal de Heisenberg  $J_x$ , selecionados dentro de cada uma das fases que formam o diagrama de fase do modelo: (a) dentro da fase CAF (b) dentro da fase SQT e (c) dentro da fase DCP.



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

Através da figura 6.26(a) pode ser visto o comportamento do calor específico dentro da fase SQT. Dentro desta fase, o calor específico pode exibir um pico duplo peculiar, onde o pico de baixa temperatura surge devido a quebra nas correlações longitudinais entre

spins de triângulos vizinhos devido ao efeito térmico. Este segundo pico inferior aparece quando o sistema se aproxima da fronteira da transição  $SQT \rightarrow CAF$ : em  $J_z = 1.0$  e  $J_x = -1.0$ .

Em contraste a esse comportamento, o calor específico mostra um comportamento usual, com um único máximo na maioria do espaço de parâmetros correspondentes à fase CAF, como visto em 6.26(b), com exceção do comportamento atípico quando os acoplamentos do modelo estão próximos da região de transição de fase DCP-CAF: em  $J_z = 1.0$  e  $J_x = 2.0$ , devido as flutuações de ordenamento magnético que surgem quando nos aproximamos muito da linha de transição para temperaturas finitas.

Na figura 6.26(c), recupera-se o efeito do pico duplo para o calor específico assumindo o conjunto de acoplamentos dentro da fase DCP. Dentro desta condição, o pico de baixa temperatura surge novamente devido a quebra nas correlações longitudinais entre spins de triângulos vizinhos, quando a agitação térmica começa a assumir um papel protagonista na orientação dos spins.

O comportamento mais interessante talvez seja a estrutura de picos duplos, mostrado nas figuras 6.26(a) e (c). A dependência térmica do calor específico a campo nulo mostra duplos picos separados quando os acoplamentos estão na vizinhanças da região de transição DCP-CAF mas ainda assim dentro da fase CAF. Nessa região, as excitações térmicas de origens diferentes são responsáveis pela existência de um pico máximo sobre  $T \approx 1.0$ , bem como um máximo intermediário próximo da temperatura  $T \approx 0.25$ , revelando o declínio gradual das correlações internas da célula unitária.

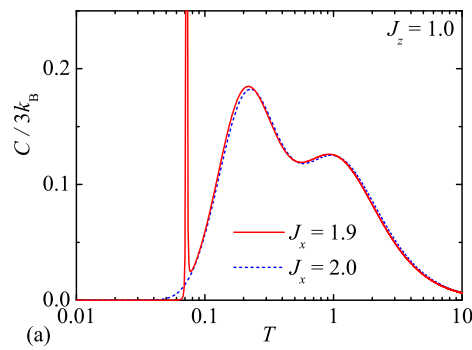
Bem como a presença de um pico agudo de baixa temperatura, , mostrado nas figuras 6.27(a) e (b), que aparece próximo de  $T \approx 0.072$ , na região de  $J_z = 1.0$  e  $J_x = 1.9$ , pode ser entendido como uma excitação térmica da fase duplamente degenerada CAF para a macroscopicamente degenerada fase DCP. A temperatura para o surgimento do pico pode ser encontrada com uma certa precisão através da expressão:

$$T_p = \frac{4 - 2J_z - J_x}{\ln 4}, \quad (6.55)$$

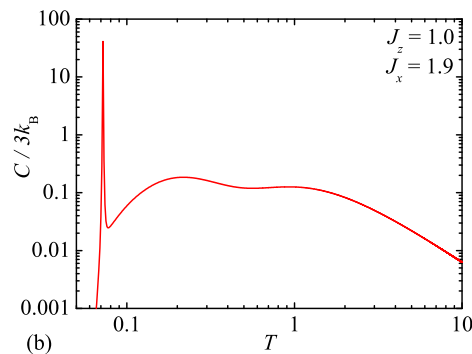
que surge pela uma comparação direta da energia livre de Helmholtz das fases CAF e DCP supondo que as variações térmicas da energia interna e entropia são simplesmente ignoradas.

A análise acima leva a concluir que o pico pontagudo de baixa temperatura do calor

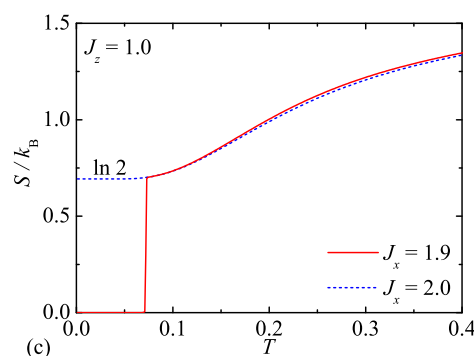
Figura 6.27: (a) Figura em escala semi-logarítmica da dependência térmica do calor específico por spin exatamente na região de transição entre as fases CAF -DCP , em  $J_z = 1.0$  e  $J_x = 2.0$ . (b) Pico inferior para o calor específico em função da temperatura quando  $J_z = 1.0$  e  $J_x = 1.9$ , numa escala logarítmica. (c) Dependência térmica do calor específico por spin exatamente na região de transição entre as fases FAC -DAQ , em  $J_z = 1.0$  e  $J_x = 2.0$ , e quando  $J_z = 1.0$  e  $J_x = 1.9$ .



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

específico aparece devido ao alto ganho entrópico, que se origina dos graus de liberdade quirais da fase DCP que possuem energia um pouco acima da energia da fase CAF. Para confirmar essa afirmação, a figura 6.27(c) mostra relevantes variações de entropia, que



providenciam uma abrupta, mas ainda assim contínua, mudança na entropia a partir do zero até  $\ln 2$  associada à dupla quiralidade, ou seja, da passagem da fase CAF para DCP. A mudança abrupta da entropia pode ser detectada pela temperatura, em concordância com a expressão para  $T_p$  6.55.

# TUBO TRIANGULAR DE SPIN- $\frac{1}{2}$ DE HEISENBERG

## 7.0.1 Método

Neste capítulo iremos confrontar os resultados exatos obtidos para o modelo de Ising-Heisenberg através do método da matriz de transferência com os resultados que podem ser obtidos para o modelo do tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg através do método do grupo de renormalização da matriz densidade através de um código aberto pertencente ao projeto ALPS (obtido da versão 2.0 do projeto ALPS) [36, 51, 88].

Sendo assim, devido à aplicação de um campo externo  $h$ , o modelo do tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg, descrito na figura 7.1, pode ser representado pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[ J \sum_{j=1}^3 \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i,j+1} + J_1 \left( \sum_{j=1}^3 \mathbf{S}_{i,j} \right) \left( \sum_{j=1}^3 \mathbf{S}_{i+1,j} \right) - h \sum_{j=1}^3 S_{i,j}^z \right], \quad (7.1)$$

Os acoplamentos de Heisenberg  $J$  e  $J_1$  possuem significado similar aos apresentados no capítulo anterior, para o modelo de Ising-Heisenberg, com exceção que agora os acoplamentos  $J_1$  para spins situados em diferentes células unitárias interagem devido a uma ligação quântica de Heisenberg, ao invés da ligação de Ising proposta no caso anterior. Este modelo foi analisado por Honecker e colaboradores [41, 51].

Tal qual o modelo do tubo de spin de Ising-Heisenberg, pode-se reescrever a equação 7.1 em termos do momento de spin total na  $i$ -ésima posição  $\mathbf{T}_i = \sum_{j=1}^3 \mathbf{S}_{i,j}$  e sua

projeção na direção  $z$  dada  $T_i^z = \sum_i^{j=3} = S_{ij}^z$ :

$$\mathcal{H} = -\frac{3NJ}{4} + \sum_{i=1}^N \left[ J_1 \mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1} + \frac{J}{4} (\mathbf{T}_i^2 + \mathbf{T}_{i+1}^2) - \frac{\hbar}{2} (T_i^z + T_{i+1}^z) \right]. \quad (7.2)$$

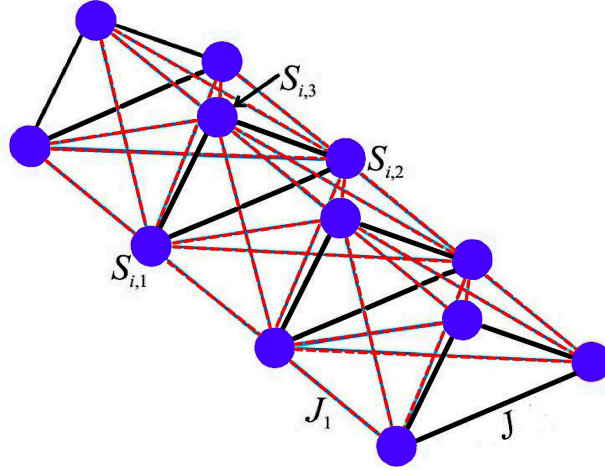


Figura 7.1: Geometria do modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  frustrado de Heisenberg. As linhas sólidas representam os acoplamentos  $J$  de Heisenberg dentro da célula unitária triangular e as linhas finas tracejadas correspondem às interações de Heisenberg  $J_1$  entre spins de diferentes células unitárias.

Torna-se evidente que foi obtida uma representação análoga a do modelo do tubo de Ising-Heisenberg, eq. 6.6. Entretanto, a equação 7.2, que define uma cadeia unidimensional composta na representação do spin total, não está numa forma completamente diagonal e preserva as características quânticas do modelo. Contudo, o spin total da célula unitária  $i$  e sua componente  $z$  continuam sendo bons números quânticos para representar o sistema.

Isto permite aplicar alguns métodos computacionais baseados no DMRG, em especial, permite utilizarmos uma versão do código (em linguagem Python) para obtermos a energia do estado fundamental de cadeias de spin de Heisenberg presente no projeto ALPS [36, 51, 88], para se obter as grandezas termodinâmicas relevantes do sistema.

Deste modo, o estado fundamental do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg pode ser obtido pela simulação numérica, através do código disponibilizado pelo projeto ALPS [88], de 3 cadeias de spin compostas:

- Cadeia efetiva de Heisenberg com spin- $\frac{3}{2}$ , cuja energia é

$$E_{\frac{3}{2}} = \frac{3}{4}NJ + J_1 E^{\frac{3}{2}}(N, S_T^z), \quad (7.3)$$

- Cadeia efetiva mista de Heisenberg com spin- $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ , cuja energia é

$$E_{\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)} = J_1 E^{\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)}(N, S_T^z), \quad (7.4)$$

- Cadeia efetiva mista de Heisenberg com spin- $\frac{1}{2}$ , cuja energia é

$$E_{\frac{1}{2}} = -\frac{3}{4}NJ + J_1 E^{\frac{1}{2}}(N, S_T^z). \quad (7.5)$$

Na notação acima,  $E^a(N, S_T^z)$  refere-se a energia da cadeia efetiva de  $N$  spins- $a$  dados pelo Hamiltoniano efetivo  $\mathcal{H}_{eff} = \sum_{i=1}^N \mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1}$  dentro do setor com spin total  $S_T^z = \sum_i^N T_i^z$ . É importante frisar que cada estado de spin  $T_i = \frac{1}{2}$  surge com duas quiralidades diferentes. Os autovalores do Hamiltoniano equação 7.3 são independentes dessa quiralidade, mas a degenerescência faz surgir uma entropia de  $k_B \ln 2$  por sítio.

O diagrama do estado fundamental e o processos de magnetização foram discutidos através de simulações da técnica de DRMG aplicada às cadeias efetivas, equações 7.3, 7.4 e 7.5, por Honecker e colaboradores [41, 51]. No presente trabalho, nós utilizamos o programa de código aberto do projeto ALPS [88] para implementar o procedimento do DMRG numa cadeia efetiva de 120 spins efetivos, que correspondem para o modelo original um tubo de spin de Heisenberg com 360 sítios.

A simulação do DMRG tem realizada com 16 sweeps, enquanto o número de estados mantidos foi de 1000. O grande número de sweeps é necessário devido à escolha de condições periódicas.

Foram encontrados os seguintes estados de menor energia para as 3 cadeias de spins compostos, equações 7.3, 7.4 e 7.5, :  $E^{\frac{1}{2}}(120, 0) = -0.44320$ ,  $E^{\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)}(120, 0) = -0.98361$  e  $E^{\frac{3}{2}}(120, 0) = -2.82832$  valores que estão de acordo com a previsão numérica prevista anteriormente em [41].

Conseqüentemente, é possível estimar o estado fundamental de energia dessas cadeias infinitas com uma precisão de aproximadamente  $10^{-4}$ . Usando as equações 7.3, 7.4 e 7.5

sem nenhuma extrapolação (exceto para os valores de campo onde ocorrem os saltos de magnetização).

## 7.0.2 Resultados e Discussões

### Diagrama do estado fundamental

A figura 7.2 faz uma comparação entre os diagramas de fase entre os dois modelos, Heisenberg e Ising-Heisenberg. O modelo do tubo de Ising Heisenberg é mostrado na figura 7.2(a) e o tubo de Heisenberg é mostrado nas figuras 7.2(b) e 7.2(c). Ambos estados fundamentais possuem várias características em comum, principalmente na região para a razão de acoplamentos  $\frac{J_1}{J} < \frac{1}{2}$ . Para região  $\frac{J_1}{J} \geq \frac{1}{2}$ , é mostrado um comportamento distinto entre os dois modelos.

Para campos suficientemente baixos, o modelo quântico de Heisenberg pode ser efetivamente descrito pelo estado de líquido de spin (SL) [47, 201], fase sem ordem de longo alcance e que pode ser a responsável pelo acoplamento dos pares de Cooper [147], da cadeia unidimensional de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg (para  $\frac{J_1}{J} < 0.629$ ), ou pelo estado de líquido de spin da cadeia unidimensional de spin- $\frac{3}{2}$  de Heisenberg (para  $\frac{J_1}{J} > 0.629$ ).

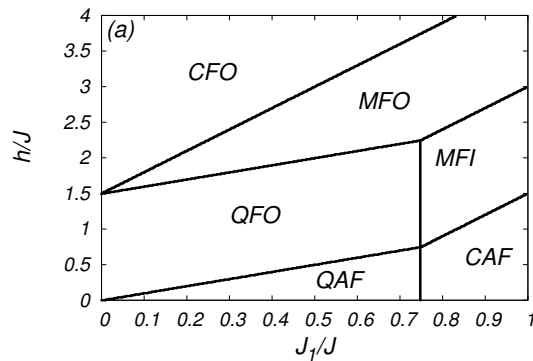
Essa conjectura ganhou ampla discussão, porque este estado LS é caracterizado pela existência de estados singletos que podem ser formados por dímeros ou plaquetas distribuídos aleatoriamente sobre uma rede cristalina. Em ambos os casos, as fases são sem gaps e podem ser caracterizadas pela mudança contínua da magnetização com o aumento do campo magnético. Os primeiros estudos sobre o ordenamento LS foram feitos na década de oitenta por Shartry e Sutherland [202]

Esse comportamento é completamente diferente, do obtido para o modelo exato de Ising-Heisenberg, devido as novas correlações quânticas introduzidas pela redefinição do acoplamento  $J_1$  como um acoplamento quântico de Heisenberg no modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg.

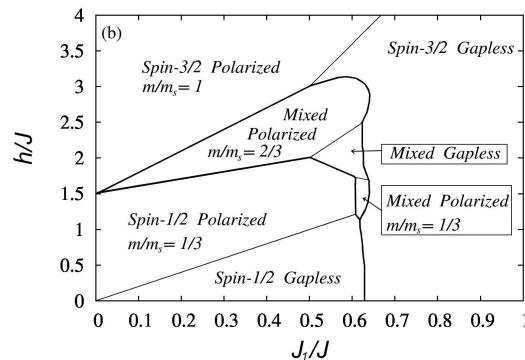
Entretanto o gap de energia do modelo efetivo de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$  próximo ao campo crítico  $h_{c1} = 2J_1$ , onde o estado completamente polarizado do modelo efetivo é o estado de menor energia do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg exceto para a região acima do segundo campo crítico  $h_{c2} = J_1 + \frac{3J}{2}$ .

É notável que o estado completamente polarizado do modelo unidimensional de spin- $\frac{1}{2}$  coincide com o estado QFO do modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg. Similar-

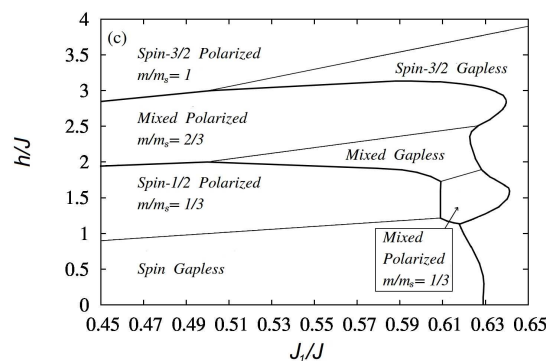
Figura 7.2: (a) Diagrama do estado fundamental para o spin- $\frac{1}{2}$  de Ising Heisenberg no plano  $\frac{J_1}{J} - \frac{h}{J}$ , onde todas as transições de fase energéticas são descontínuas. (b) Diagrama do estado fundamental para o spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg no plano  $\frac{J_1}{J} - \frac{h}{J}$ , onde quatro transições de fase possuem gaps e três transições são contínuas. (c) Uma ampliação do diagrama de fase do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg, que mostra a característica reentrante da linha de transição relativa à fase de spin- $\frac{3}{2}$ . As linhas grossas (finas) denotam uma transição de primeira ordem (segunda ordem).



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

mente, o estado completamente polarizado do modelo unidimensional de Heisenberg misto de spin- $(\frac{3}{2}, \frac{1}{2})$  aparece como outro auto-estado do modelo de tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisen-

berg entre o segundo e o terceiro campo crítico  $h_{c2} = J_1 + \frac{3J}{2}$  e  $h_{c3} = 3J_1 + \frac{3J}{2}$ , sendo exatamente idêntico ao estado fundamental MFO do modelo do tubo de spin de Ising-Heisenberg. Além disto, este auto-estado é delimitado precisamente pelos mesmos campos críticos encontrados para a fase MFO.

Desta forma, existe uma perfeita coincidência entre o diagrama de fase do tubo de Ising-Heisenberg e o tubo de Heisenberg na região do espaço de parâmetros delimitada por  $\frac{J_1}{J} < \frac{1}{2}$  e  $h > 2J_1$ , onde a razão de interação  $\frac{J_1}{J}$  é suficientemente pequena.

Em contraste a isso, os estados fundamentais, dos diagramas de fase dos modelos de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg e Heisenberg, figuras 7.2(a) e 7.2(b), mostram um comportamento distinto para a razão de interação  $\frac{J_1}{J} > \frac{1}{2}$ . Além disto, existem três regiões contínuas para o modelo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg para essa região, correspondendo às cadeias efetivas de spin- $\frac{1}{2}$ , spin- $\frac{3}{2}$  e de spin misto  $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$  de Heisenberg. Uma nova região de platô correspondente a um platô intermediário de um terço da magnetização de saturação pode ser encontrada para uma região de campo intermediário.

O platô da cadeia efetiva de spin misto  $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$  de Heisenberg gera o novo platô de um terço de magnetização para o modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg, que possui uma origem completamente diferente que o platô de magnetização de um terço originado pela cadeia efetiva unidimensional de spin  $\frac{1}{2}$ . Pode ser mostrado, entretanto, que o estado fundamental MFI do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg não pode capturar o alinhamento de spins desse novo estado quântico do modelo do tubo de spin de Heisenberg.

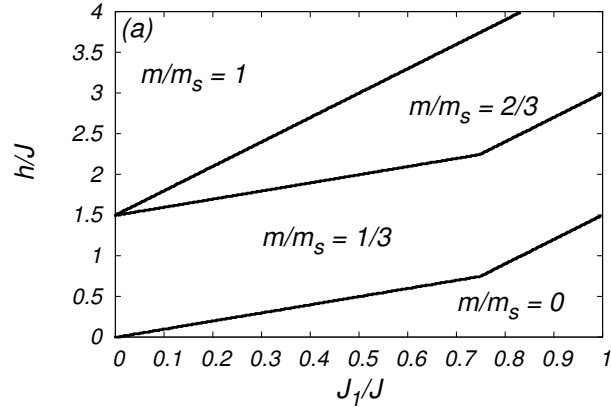
## Processos de Magnetização

Agora, iremos analisar as curvas de magnetização do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg, comparando-o ao modelo exato de Ising-Heisenberg, assim como foi feito com o diagrama de estado fundamental.

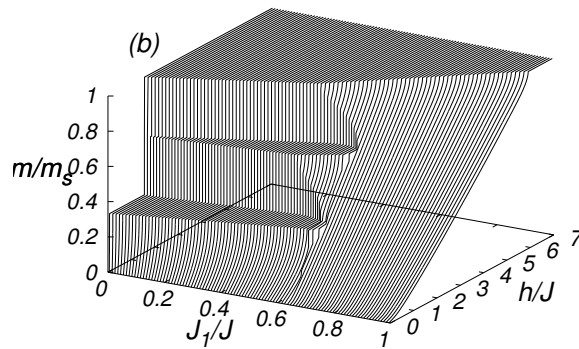
De acordo com a regra de Oshikawa-Affleck-Yamanaka [23], o tubo triangular de spin- $\frac{1}{2}$  pode exibir platôs de magnetização intermediários na região zero, um terço e dois terços da magnetização de saturação quando a duplicação da célula unitária é levada em consideração. Isto pode ser observado, na figura (a), para o tubo de Ising-Heisenberg que exibe todos os platôs de magnetização possíveis.

Para o caso de temperatura nula, a dinâmica dos processos de magnetização do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg pode ser obtido utilizando os valores de magnetização dos estados

Figura 7.3: Gráfico da magnetização normalizada com respeito ao valor de saturação em função do campo magnético  $\frac{h}{J}$  e da razão dos acoplamentos para  $\frac{J_1}{J}$  ilustrados em: (a) Modelo do tubo de Ising-Heisenberg; (b) Modelo do tubo de Heisenberg.



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

de menor energia adquiridos com a técnica do DMRG para as três cadeias de spin efetivas, calculando-se separadamente cada setor de magnetização com spin total  $S_T^z$ .

O campo magnético será obtido através da mudança do spin total de  $S_T^z$  para  $S_T^z + 1$ , pela diferença entre os estados fundamentais para cada um desses setores adjacentes, ou seja,  $h = E_g^{h=0}(N, S_T^z + 1) - E_g^{h=0}(N, S_T^z)$ , em campo nulo. A figura (b) mostra um gráfico em três dimensões da magnetização em função do campo magnético  $\frac{h}{J}$  aplicado e da razão de interação  $\frac{J_1}{J}$ . Como pode ser visto, a magnetização varia continuamente do zero até o valor de saturação, quando a razão entre os acoplamentos  $\frac{J_1}{J} > 0.64$ .

Entretanto, a magnetização mostra, figura 7.4(b), um crescimento suave com o aumento do campo magnético até que encontra o platô de magnetização em um terço quando a razão de interação é menor que  $\frac{J_1}{J} > 0.5$ . O platô de magnetização em um terço é subse-



quentemente substituído por um salto abrupto da magnetização levando a magnetização até o platô dois terços, tendo seu fim no campo de saturação onde a magnetização vai para seu valor de saturação. Ainda pode ser mencionado que o comportamento mais relevante pode ser obtido nas regiões de valor intermediário dos acoplamentos:  $0.64 > \frac{J_1}{J} > 0.5$ , que pode incluir uma mudança contínua na magnetização entre os platôs intermediários devido à presença da variação contínua do estado fundamental de líquido de spin.

### Emaranhamento Quântico

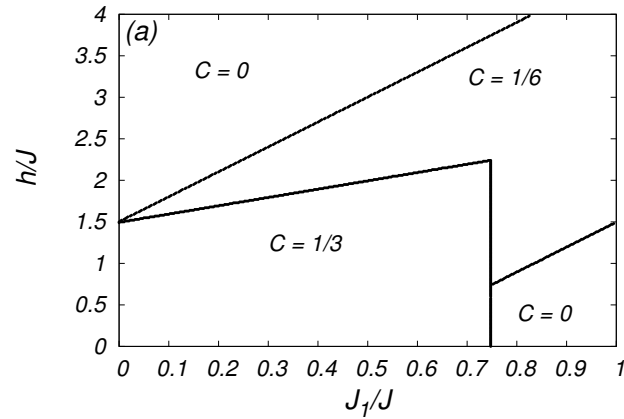
Para o caso do modelo do tubo de Ising-Heisenberg, devido às características clássicas do acoplamento de Ising  $J_1$ , não há presença de correlações quânticas para os spins situados em diferentes células triangulares adjacentes. Como esperado, o modelo de Ising-Heisenberg não apresenta emaranhamento quântico entre diferentes células unitárias, exatamente o oposto do que acontece dentro das células unitárias, onde há correlações quânticas entre os spins devido ao acoplamento interno de Heisenberg  $J$ . Com isto em mente, nos propomos a explorar o emaranhamento quântico agora para os spins situados em diferentes células unitárias ligados pelo acoplamento quântico de Heisenberg, criando correlações quânticas no modelo do tubo de Heisenberg antes não vistas no modelo de Ising-Heisenberg.

Para tal feito a concorrência, dada pela equação 6.50, será usada mais uma vez como um quantificador do emaranhamento quântico entre os spins do tubo de spin- $\frac{1}{2}$ . O diagrama resultante desta análise de emaranhamento é mostrado na figura 7.4.

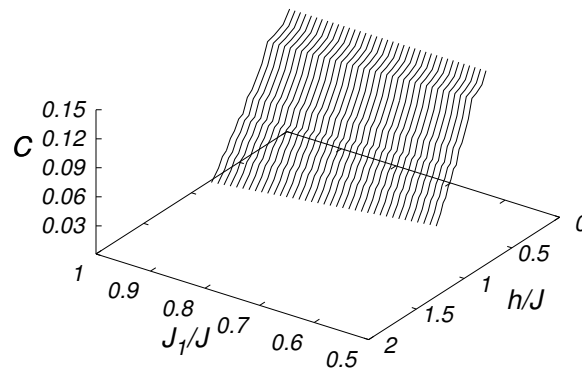
Na figura 7.4, o emaranhamento quântico entre dois spins, definido pela função concorrência  $C$  como função do campo magnético  $\frac{h}{J}$  e da razão entre os acoplamentos para  $\frac{J_1}{J}$  é ilustrado em: 7.4(a) valor de  $C$  para spins situados dentro da célula triangular, interligados pelo acoplamento  $J$ , no modelo do tubo de Ising-Heisenberg; 7.4(b) valor de  $C$  para spins situados em diferentes células triangulares, interligados pelo acoplamento  $J_1$ , no modelo do tubo de Heisenberg.

Pode-se assim observar que existem diferenças profundas nos comportamentos do emaranhamento dentro e fora da célula unitária.

Figura 7.4: Emaranhamento quântico entre dois spins, definido pela função concorrência  $C$  como função do campo magnético  $\frac{h}{J}$  e da razão dos acoplamentos para  $\frac{J_1}{J}$  ilustrados em: (a) valor de  $C$  para spins situados dentro dentro da célula triangular, interligados pelo acoplamento  $J$ , no modelo do tubo de Ising-Heisenberg; (b) valor de  $C$  para spins situados em diferentes células triangulares, interligados pelo acoplamento  $J_1$ , no modelo do tubo de Heisenberg.



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

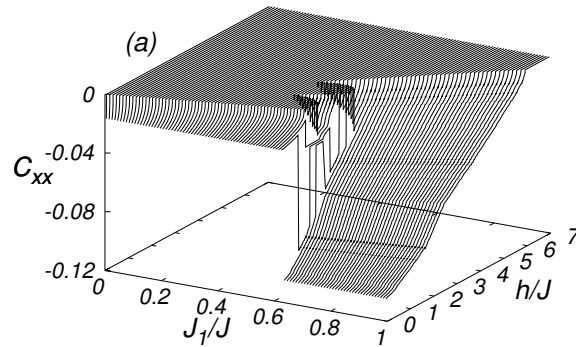
## Funções de Correlações

Para se esclarecer esse comportamento distinto, propomos a observação das correlações entre pares de spins, ilustrados na figura 7.5. Nesta análise, foram calculadas, usando a técnica do DMRG, as correlações de pares:  $C_{XX} = \langle \hat{S}_{i,j}^x \hat{S}_{i+1,j}^x \rangle$  e  $C_{ZZ} = \langle \hat{S}_{i,j}^z \hat{S}_{i+1,j}^z \rangle$ , para os spins interligados pelo acoplamento de Heisenberg  $J_1$ . Como esperado, as funções  $C_{ZZ}$  e  $C_{XX}$  exibem plátos e regiões em que as funções de correlação crescem continuamente com o aumento do campo externo, semelhantes aos encontrados na figura (b), que ilustra o comportamento da magnetização local do modelo do tubo de spin de Heisenberg.

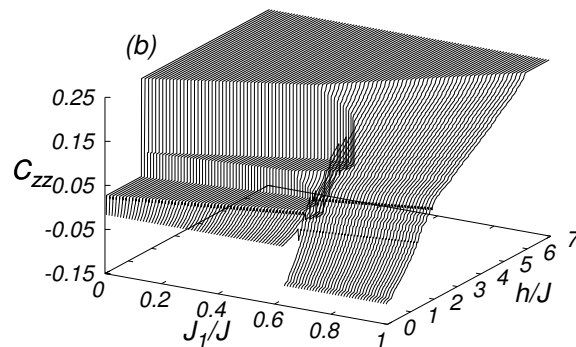
Na figura 7.5(a), observa-se que a correlação transversal  $C_{XX}$  entre spins de triângulos

vizinhos é nula para as regiões de platôs, excluindo a possibilidade de emaranhamento quântico dentro dessas regiões. Desta forma, o emaranhamento quântico só pode ser encontrado na região,  $\frac{J_1}{J} > 0.62$ , onde há um aumento contínuo da correlação transversal  $C_{XX}$  em função do campo externo  $h$ . Para campos intensos é encontrado um platô da magnetização de saturação, onde não há emaranhamento quântico, devido a polarização dos spins com o campo magnético externo.

Figura 7.5: Gráfico das correlações dos spins  $C_{xx}$  e  $C_{zz}$  para os spins situados em diferentes células unitárias, interligados pelo acoplamento  $J_1$ , em função do campo magnético  $\frac{h}{J}$  e da razão dos acoplamentos  $\frac{J_1}{J}$ .



Fonte: Autor, 2017.



Fonte: Autor, 2017.

Deve ser comentado, contudo, que surpreendentemente o estado "spin- $\frac{1}{2}$  gapless" não apresenta emaranhamento quântico, que é suprimido pela competição das funções de correlação e da polarização do campo magnético, como mostrado na figura 7.5(a).

## CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

Neste trabalho, fornecemos uma comparação detalhada das propriedades termodinâmicas e de emaranhamento quântico dos modelos frustrados de spin- $\frac{1}{2}$  do tubo triangular de Ising-Heisenberg e do tubo triangular de Heisenberg na presença de um campo externo. Os modelos diferenciam-se entre si pela presença ou não das correlações quânticas dadas pelo acoplamento  $J_1$  que representa as ligações entre spins de diferentes células unitárias consecutivas. Consideramos ainda nos cálculos analíticos do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg o caso anisotrópico da constante  $J$  que representa as ligações internas da célula unitária triangular do modelo. Todos os estados fundamentais dos dois modelos foram minuciosamente avaliados e os respectivos diagramas de fase foram contruídos para região em que razão de acoplamentos  $\frac{J_1}{J} > 0$ .

O procedimento que usamos para o estudo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg foi a diagonalização exata do Hamiltoniano que descreve o sistema para obter os auto-estados de energia e assim detalhar o diagrama de fase. Utilizando o formalismo da matriz de transferência, o comportamento térmico das correlações entre os spins das cadeias foi determinado, bem como o diagrama de fase do modelo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg que envolve quatro estados fundamentais quânticos: QAF, QFO, MFI e MFO em conjunto com dois estados fundamentais clássicos: CAF e CF. Cada par de spins dentro da mesma célula unitária está quanticamente emaranhado dentro das fases QAF e QFO, enquanto o emaranhamento quântico ocorre alternadamente, se uma célula apresentar a subsequente não irá apresentar, nas células triangulares dentro da fase MFI e MFO. O emaranhamento quântico entre spins vizinhos pertencentes ao mesmo triângulo de Heisenberg é confirmado mesmo na ausência de campo externo.

Em contraste a isso, o diagrama de fase de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg envolve apenas um estado fundamental clássico, 3 estados fundamentais quânticos com platôs de magnetização local, "gapped", e 3 estados fundamentais quânticos com aumento contínuo da magnetização local com o campo externo  $h$ , "gapless". O estado fundamental clássico e dois estados quânticos gapped podem ser exatamente indentificados como os três estados CF, QFO e MFO do modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg. Sabendo deste fato, torna-se fácil compreender a perfeita coincidência entre o diagrama de fase do tubo de Ising-Heisenberg e do tubo de Heisenberg na região de parâmetros  $\frac{J}{J'} < \frac{1}{2}$  e  $h > 2J_1$  inerente a esses estados fundamentais. No resto do espaço de parâmetros, ocorre substancial diferença entre os estados gapless com características de líquido de spin presentes no modelo de Heisenberg com as regiões gapped do modelo de Ising-Heisenberg. Conseqüentemente, o cenário de magnetização do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg é bem mais diverso em comparação com o processo de magnetização do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg, que sempre envolve os platôs de zero, um terço e dois terços e saltos de magnetização entre eles.

Nas curvas do calor específico versus temperatura, para o modelo do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg, nota-se uma estrutura de duplos picos, o que reflete a competição entre dois possíveis estados fundamentais. Primeiro, há o surgimento de um pico intenso no calor específico, chamando efeito Schottky, bastante ingreme devido ao "crossover" termicamente induzido de um estado altamente degenerado para um estado pouco degenerado. Para campo nulo, um segundo pico é também visto remanescente da transição entre as fases QAF e QFO.

A análise do comportamento da desmagnetização adiabática do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Ising-Heisenberg foi feita observando-se a curva da temperatura versus campo, para linhas de entropia constante (linhas adiabáticas). Pudemos observar que a maior taxa de resfriamento ocorre quando diminuimos o campo nas proximidades dos valores críticos (valores de campo que definem as transições entre os estados fundamentais). Entretanto, se o campo externo for reduzido a partir de um valor crítico ocorrerá uma maior taxa de aquecimento, existindo assim um duplo comportamento do sistema, efeito semelhante aparece num mineral do grupo dos carbonatos com composição química  $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$  conhecido como azurita.

O processo de magnetização do tubo de spin- $\frac{1}{2}$  de Heisenberg não se resume apenas a regiões de platôs, mas também contém regiões de transição contínua sem saltos da

magnetização. Sendo assim, podem ou não surgir platôs intermediários de um terço e dois terços da magnetização de saturação dependendo da razão relativa entre os acoplamentos  $\frac{J_1}{J}$ . Em adição a isso, o modelo do tubo de Heisenberg pode exibir emaranhamento quântico para os spins que são interligadas pelo acoplamento  $J_1$ , situados em diferentes células unitárias adjacentes.

Por fim, enfatizamos que este trabalho abre perspectivas bastante promissoras na pesquisa de emaranhamento quântico e desmagnetização adiabática em sistemas magnéticos modelados por cadeias de spin anisotrópicas do tipo Ising ou Heisenberg com estruturas mais elaboradas. Pode-se introduzir frustrações cinematicamente induzidas neste tubo de spin triangular com geometrias mais complexas. É interessante incluir também o hopping quântico entre os spins de células vizinhas que é relevante para o estudo de magnetismo em sistemas de spins itinerantes. Entretanto, como no caso do modelo do tubo de Heisenberg, uma solução exata para as quantidades termodinâmicas deste não seria possível. Como no caso do modelo do tubo de Heisenberg, deve-se recorrer a métodos numéricos para o estudo de sistemas finitos ou técnicas de Grupo de Renormalização de Matriz Densidade.

Em resumo, esperamos que a presente tese possa estimular futuros estudos de emaranhamento quântico e não-localidade em sistemas magnéticos frustrados de baixa dimensionalidade que possam explorar suas potenciais aplicações científicas e tecnológicas no mapeamento de compostos magnéticos reais.

## Referências Bibliográficas

- [1] Kouwenhoven, L. and Glazman, L. *Physics World* **14**(1), 33 (2001).
- [2] Cullity, B. and Graham, C. *Introduction to Magnetic Materials*. Wiley, (2009).
- [3] Yosida, K. *Theory of Magnetism*. Springer Series in Solid-State Science. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (1996).
- [4] Binder, K. and Young, A. P. *Disordered and Frustrated Spin Systems*. John Wiley and Sons, Ltd, (2007).
- [5] Parkinson, J. B. and Farnell, D. J. J. *An Introduction to Quantum Spin Systems*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, (2010).
- [6] Lenz, W. *Z. Phys.* **21** **613** (1920).
- [7] Ising, E. *Z. Phys.* **31** **253** (1925).
- [8] Bhattacharjee, S. M. and Khare, A. *Current science* **69**(10), 816–821 (1995).
- [9] LÍBERO, V. L. *Revista Brasileira do Ensino de Física* **22**(3) Mar (2000).
- [10] Lee, T. D. and Yang, C. N. *Phys. Rev.* **87**, 410–419 Aug (1952).
- [11] Heisenberg, W. *Zeitschrift fur Physik* **38**(6), 411–426 (1926).
- [12] Dirac, P. A. M. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **112**(762), 661–677 (1926).
- [13] Bragg, W. and Williams, E. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **145**(199), 661–677 (1934).

- 
- [14] Gorsky, W. *Z. Phys.* **50** **64** (1928).
- [15] Bethe, H. A. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **150**(871), 552–575 (1935).
- [16] Bethe, H. *Zeitschrift für Physik* **71**(3), 205–226 (1931).
- [17] Peierls, R. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **32**, 477–481 10 (1936).
- [18] Kramers, H. A. and Wannier, G. H. *Phys. Rev.* **60**, 252–262 Aug (1941).
- [19] Lidiard, A. B. *Reports on Progress in Physics* **17**(1), 201 (1954).
- [20] Onsager, L. *Phys. Rev.* **65**, 117–149 Feb (1944).
- [21] Navarro, L. and Pérez, E. *Archive for History of Exact Sciences* **58**(2), 97–141 (2004).
- [22] Mermin, N. D. and Wagner, H. *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133–1136 Nov (1966).
- [23] Oshikawa, M., Yamanaka, M., and Affleck, I. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984–1987 Mar (1997).
- [24] Cosgrove, B. A., Lohmann, D., Mitchell, K. E., Houser, P. R., Wood, E. F., Schaake, J. C., Robock, A., Sheffield, J., Duan, Q., Luo, L., Higgins, R. W., Pinker, R. T., and Tarpley, J. D. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* **108**(D22), n/a–n/a (2003). 8845.
- [25] Sandvik, A. W. and Kurkijärvi, J. *Phys. Rev. B* **43**, 5950–5961 Mar (1991).
- [26] Pathak, A. *Elements of Quantum Computation and Quantum Communication*. CRC Press, (2013).
- [27] Lacroix, C., Mendels, P., and Mila, F. *Introduction to Frustrated Magnetism*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, (2011).
- [28] Baake, M. and Grimm, U. *Perspectives on Solvable Models*. World Scientific Publishing Co Pte Ltd, Singapore, (1995).



- [29] Amico, L., Osterloh, A., Plastina, F., Fazio, R., and Massimo Palma, G. *Physical Review A* **69**(2), 022304 February (2004).
- [30] Bengtsson, I. and Życzkowski, K. *Geometry of quantum states: an introduction to quantum entanglement*. Cambridge University Press, (2006).
- [31] Heilmann, I. U., Shirane, G., Endoh, Y., Birgeneau, R. J., and Holt, S. L. *Phys. Rev. B* **18**, 3530–3536 Oct (1978).
- [32] von Stecher, J., Wunsch, B., Lukin, M., Demler, E., and Rey, A. M. *Phys. Rev. B* **82**, 125437 Sep (2010).
- [33] Welzel, J., Bautista-Salvador, A., Abarbanel, C., Wineman-Fisher, V., Wunderlich, C., Folman, R., and Schmidt-Kaler, F. *The European Physical Journal D* **65**(1), 285–297 (2011).
- [34] Binek, C. *Ising-type Antiferromagnets*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, (2003).
- [35] Jones, C. *A química dos elementos dos blocos D e F*. Bookman, (2002).
- [36] Strečka, J., Alécio, R. C., Lyra, M. L., and Rojas, O. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **409**, 124 – 133 (2016).
- [37] Hase, M., Terasaki, I., and Uchinokura, K. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3651–3654 6 (1993).
- [38] Takano, M. *Physica C: Superconductivity* **263**(1), 468 – 474 (1996).
- [39] Cabra, D. C., Honecker, A., and Pujol, P. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5126–5129 Dec (1997).
- [40] Cabra, D. C., Honecker, A., and Pujol, P. *Phys. Rev. B* **58**, 6241–6257 Sep (1998).
- [41] Honecker, A., Mila, F., and Troyer, M. *Eur. Phys. J. B* **15**(2), 227–233 (2000).
- [42] Okunishi, K., Sato, M., Sakai, T., Okamoto, K., and Itoi, C. *Journal of the Korean Physical Society* **63**(3), 596–600 (2013).
- [43] Bose, I. *eprint arXiv:cond-mat/0502019* February (2005).

- [44] Schultz, T. D., Mattis, D. C., and Lieb, E. H. *Rev. Mod. Phys.* **36**, 856–871 Jul (1964).
- [45] Ivanov, N. B., Schnack, J., Schnalle, R., Richter, J., Kögerler, P., Newton, G. N., Cronin, L., Oshima, Y., and Nojiri, H. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 037206 Jul (2010).
- [46] Garlea, V. O., Zheludev, A., Regnault, L.-P., Chung, J.-H., Qiu, Y., Boehm, M., Habicht, K., and Meissner, M. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 037206 Jan (2008).
- [47] Sato, M. *Phys. Rev. B* **75**, 174407 May (2007).
- [48] Stauffer, D. *American Journal of Physics* **76**(4), 470–473 (2008).
- [49] Hazan, A. and Randon-Furling, J. *The European Physical Journal B* **86**(10), 1–9 (2013).
- [50] Restrepo, J. G. and Karma, A. *Chaos* **19**(3) (2009).
- [51] Alécio, R. C., Lyra, M. L., and Strečka, J. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **417**, 294 – 301 (2016).
- [52] Alécio, R. C., Lyra, M. L., and Strečka, J. *J. Phys. Condens. Matter* .
- [53] Wilson, K. G. *Rev. Mod. Phys.* **55**, 583–600 Jul (1983).
- [54] Bulla, R., Costi, T. A., and Pruschke, T. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 395–450 Apr (2008).
- [55] Heitler, W. and London, F. *Zeitschrift für Physik* **44**(6), 455–472 (1927).
- [56] Crangle, J. *Acta Crystallographica Section A* **31**(6), 879 Nov (1975).
- [57] Samuelsen, E. J., Silbergliitt, R., Shirane, G., and Remeika, J. P. *Phys. Rev. B* **3**, 157–166 Jan (1971).
- [58] Cowley, R. A. *The Excitations of One-Dimensional Spin 1/2 Antiferromagnets*, 5–27. Springer Netherlands, Dordrecht (1998).
- [59] Salinas, S. *Introdução a Física Estatística Vol. 09*. EDUSP, (1997).
- [60] Falk, H. *American Journal of Physics* **38**(7), 858–869 (1970).

- [61] Mayer, D. H. *The Kramers-Wannier transfer matrix*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, (1980).
- [62] Fisher, M. E. *American Journal of Physics* **32**(5), 343–346 (1964).
- [63] Majumdar, C. K. and Ghosh, D. K. *Journal of Mathematical Physics* **10**(8), 1388–1398 (1969).
- [64] Warburg, E. *Annalen der Physik* **249**(5), 141–164 (1881).
- [65] Debye, P. *Annalen der Physik* **386**(25), 1154–1160 (1926).
- [66] Giauque, W. F. *Journal of the American Chemical Society* **49**(8), 1864–1870 (1927).
- [67] Giauque, W. F. and MacDougall, D. P. *Phys. Rev.* **43**, 768–768 May (1933).
- [68] Quintero, M., Sacanell, J., Ghivelder, L., Gomes, A., Leyva, A., and Parisi, F. *Applied Physics Letters* **97**(12), 121916 September (2010).
- [69] Capovilla, M. S., Lozano, J. A., Trevizoli, P. V., and Jr., J. R. B. *Science and Technology for the Built Environment* **22**(5), 534–543 (2016).
- [70] Pecharsky, V. K. and Gschneidner, Jr., K. A. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4494–4497 Jun (1997).
- [71] Morellon, L., Magen, C., Algarabel, P. A., Ibarra, M. R., and Ritter, C. *Applied Physics Letters* **79**(9), 1318–1320 (2001).
- [72] Pereira, M. S. S. *Platô na Magnetização e Efeito Magnetocalórico na Cadeia Diamante Cineticamente Frustrada*. PhD thesis, Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Maceio, 3 (2008).
- [73] Grüneisen, E. *Annalen der Physik* **344**, 257–306 (1912).
- [74] Tishin, A. M., Gschneidner, K. A., and Pecharsky, V. K. *Phys. Rev. B* **59**, 503–511 Jan (1999).
- [75] Amico, L., Fazio, R., Osterloh, A., and Vedral, V. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517–576 May (2008).
- [76] Newell, G. F. and Montroll, E. W. *Rev. Mod. Phys.* **25**, 353–389 Apr (1953).

- [77] van Hemmen, J. L. and Morgenstern, I. *Heidelberg Colloquium on Glassy Dynamics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (1987).
- [78] Wu, F. Y. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235–268 Jan (1982).
- [79] Nogueira, E., Nobre, F. D., Coutinho, S., and de Almeida, J. R. L. *Phys. Rev. E* **53**, 5742–5748 Jun (1996).
- [80] Ito, K. *Physics Letters A* **85**(4), 195 – 196 (1981).
- [81] Zhou, J.-S. and Goodenough, J. B. *Phys. Rev. B* **77**, 132104 Apr (2008).
- [82] Choudhury, N., Walter, E. J., Kolesnikov, A. I., and Loong, C.-K. *Phys. Rev. B* **77**, 134111 Apr (2008).
- [83] Bednorz, J. G. and Müller, K. A. *Nobel Media* Mar (1987).
- [84] Soares, A. B., Silva, P. R. N. d., Freitas, J. C. C., and Almeida, C. M. d. *Química Nova* **30**, 1061 – 1066 10 (2007).
- [85] Li, B.-Q., Tang, C., Wang, H.-F., Zhu, X.-L., and Zhang, Q. *Science Advances* **2**(10) (2016).
- [86] Nielsen, M. and Chuang, I. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge Series on Information and the Natural Sciences. Cambridge University Press, (2000).
- [87] Orús, R. *Annals of Physics* **349**, 117–158 October (2014).
- [88] Bauer, B., Carr, L. D., Evertz, H. G., Feiguin, A., Freire, J., Fuchs, S., Gamper, L., Gukelberger, J., Gull, E., Guertler, S., Hehn, A., Igarashi, R., Isakov, S. V., Koop, D., Ma, P. N., Mates, P., Matsuo, H., Parcollet, O., Pawłowski, G., Picon, J. D., Pollet, L., Santos, E., Scarola, V. W., Schollwöck, U., Silva, C., Surer, B., Todo, S., Trebst, S., Troyer, M., Wall, M. L., Werner, P., and Wessel, S. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2011**(05), P05001 (2011).
- [89] Sciara, S., Lo Franco, R., and Compagno, G. *Scientific Reports* **7**, 44675 Mar (2017). Article.
- [90] Bell, J. S. *Physics* **1**, 195–200 (1964).

- [91] Schrödinger, E. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **31**(4), 555–563 (1935).
- [92] Einstein, A., Podolsky, B., and Rosen, N. *Phys. Rev.* **47**, 777–780 May (1935).
- [93] BELL, J. S. *Rev. Mod. Phys.* **38**, 447–452 Jul (1966).
- [94] Von Neumann, J. *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. Investigations in physics. Princeton University Press, (1955).
- [95] Schollwöck, U. *Annals of Physics* **326**, 96–192 January (2011).
- [96] Affleck, I., Kennedy, T., Lieb, E. H., and Tasaki, H. *Physical Review Letters* **59**, 799–802 August (1987).
- [97] Bengua, J. A., Phien, H. N., Tuan, H. D., and Do, M. N. *ArXiv e-prints* March (2015).
- [98] Trefethen, L. and Bau, D. *Numerical Linear Algebra*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM, 3600 Market Street, Floor 6, Philadelphia, PA 19104), (1997).
- [99] Obsieger, B. *Numerical Methods II - Roots and Equation Systems*. Numerical Methods. Boris Obsieger, (2013).
- [100] Chen, K. and Wu, L.-A. *eprint arXiv:quant-ph/0205017* May (2002).
- [101] Griffiths, D. *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, (2016).
- [102] Faye, J. In *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*, Zalta, E. N., editor. Metaphysics Research Lab, Stanford University fall 2014 edition (2014).
- [103] Aspect, A. *Nature* **398**(6724), 189–190 Mar (1999).
- [104] Dalton, B. J. and Reid, M. D. *ArXiv e-prints* November (2016).
- [105] Schrödinger, E. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **31**(4), 555–563 10 (1935).
- [106] Gerlach, W. and Stern, O. *Zeitschrift für Physik* **9**(1), 349–352 (1922).

- [107] Wang, Y. *ArXiv e-prints* October (2012).
- [108] Bloch, F. *Physical Review* **70**, 460–474 October (1946).
- [109] Bohm, D. *Phys. Rev.* **85**, 166–179 Jan (1952).
- [110] Aspect, A., Grangier, P., and Roger, G. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 91–94 Jul (1982).
- [111] Aspect, A., Dalibard, J., and Roger, G. *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1804–1807 Dec (1982).
- [112] Greenberger, D. M., Horne, M. A., Shimony, A., and Zeilinger, A. *American Journal of Physics* **58**(12), 1131–1143 (1990).
- [113] Clauser, J. F., Horne, M. A., Shimony, A., and Holt, R. A. *Phys. Rev. Lett.* **23**, 880–884 Oct (1969).
- [114] Bell, J., Bell, M., Gottfried, K., and Veltman, M. *John S. Bell on the Foundations of Quantum Mechanics*. World Scientific, (2001).
- [115] Cirel'son, B. S. *Letters in Mathematical Physics* **4**(2), 93–100 (1980).
- [116] Werner, R. F. *Phys. Rev. A* **40**, 4277–4281 Oct (1989).
- [117] Chitambar, E., Leung, D., Mančinska, L., Ozols, M., and Winter, A. *Communications in Mathematical Physics* **328**, 303–326 May (2014).
- [118] Blank, J., Exner, P., and Havlíček, M. *Hilbert Space Operators in Quantum Physics*. Theoretical and Mathematical Physics. Springer Netherlands, (2008).
- [119] Bennett, C. H. and Brassard, G. *SIGACT News* **18**(4), 51–53 July (1987).
- [120] Schumacher, B. W. *Phys. Rev. A* **44**, 7047–7052 Dec (1991).
- [121] Ioannou, L. M. *eprint arXiv:quant-ph/0603199* March (2006).
- [122] Peres, A. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1413–1415 Aug (1996).
- [123] Nielsen, M. A. and Kempe, J. *Physical Review Letters* **86**, 5184–5187 May (2001).
- [124] Simon, R. *Physical Review Letters* **84**, 2726–2729 March (2000).
- [125] Chruściński, D. and Rutkowski, A. *Physics Letters A* **375**, 2793–2796 July (2011).

- [126] van Hove, L. *Bull. Amer. Math. Soc.* **64**, 95–99 05 (1958).
- [127] Yeomans, J. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Clarendon Press, (1992).
- [128] KINGMAN, J. F. C. *The Quarterly Journal of Mathematics* **12**(1), 283 (1961).
- [129] Lewenstein, M., Kraus, B., Cirac, J. I., and Horodecki, P. *physical review A* **62**(5), 052310 November (2000).
- [130] Yuan, X., Mei, Q., Zhou, S., and Ma, X. *physical review A* **93**(4), 042317 April (2016).
- [131] Pan, J.-W., Simon, C., Brukner, C., and Zeilinger, A. *Nature* **410**, 1067–1070 apr (02001).
- [132] Hill, S. and Wootters, W. K. *Physical Review Letters* **78**, 5022–5025 June (1997).
- [133] Horodecki, M., Horodecki, P., and Horodecki, R. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 574–577 Jan (1997).
- [134] D’Ariano, G. M., Laurentis, M. D., Paris, M. G. A., Porzio, A., and Solimeno, S. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics* **4**(3), S127 (2002).
- [135] Yuen-Zhou, J., Krich, J. J., Kassal, I., Johnson, A. S., and Aspuru-Guzik, A. In *Ultrafast Spectroscopy*, 2053-2563, 1–1 to 1–9. IOP Publishing (2014).
- [136] Su, S.-Q., Song, J.-L., and Gu, S.-J. *Physical Review A* **74**(3), 032308 September (2006).
- [137] Deng, S.-S. and Gu, S.-J. *Chinese Physics Letters* **22**, 804–807 April (2005).
- [138] Clogston, A. M., Matthias, B. T., Peter, M., Williams, H. J., Corenzwit, E., and Sherwood, R. C. *Phys. Rev.* **125**, 541–552 Jan (1962).
- [139] de Subramanian, S. F. *Química Nova* **20**, 313 – 318 06 (1997).
- [140] Wilson, K. G. *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773–840 Oct (1975).
- [141] Escote, M. T. *Estudo da transição metal-isolante em óxidos de terra-rara e níquel*. PhD thesis, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, 11 (2002).

- [142] Kochmański, M., Paszkiewicz, T., and Wolski, S. *European Journal of Physics* **34**, 1555 November (2013).
- [143] Friedel, J. *Il Nuovo Cimento (1955-1965)* **7**(2), 287–311 (1958).
- [144] Wilson, K. G. *Phys. Review B* **4**, 3174–3183 November (1971).
- [145] Stolz, G. *ArXiv e-prints* 4 (2011).
- [146] Kadanoff, L., Baym, G., and Pines, D. *Quantum Statistical Mechanics*. Advanced Books Classics Series. Avalon Publishing, (1994).
- [147] Bardeen, J., Cooper, L. N., and Schrieffer, J. R. *Phys. Rev.* **108**, 1175–1204 Dec (1957).
- [148] Kittel, C. *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 6th edition, (1986).
- [149] Zeoli, C., Machleidt, R., and Entem, D. R. *Few-Body Systems* **54**, 2191–2205 December (2013).
- [150] Stanley, H. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. International series of monographs on physics. Oxford University Press, (1971).
- [151] Anderson, P. *More and Different: Notes from a Thoughtful Curmudgeon*. World Scientific, (2011).
- [152] Wilson, K. G. *Advances in Mathematics* **16**(2), 170 – 186 (1975).
- [153] Krishna-murthy, H. R., Wilkins, J. W., and Wilson, K. G. *Phys. Rev. B* **21**, 1044–1083 Feb (1980).
- [154] Schrieffer, J. R. and Wolff, P. A. *Physical Review* **149**, 491–492 September (1966).
- [155] Anderson, P. W. *Phys. Rev.* **124**, 41–53 Oct (1961).
- [156] Andrade-Neto, A. V. *Revista Brasileira de Ensino de Física* **39** 00 (2017).
- [157] Wiegmann, P. B. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **14**(10), 1463 (1981).
- [158] Bravyi, S., DiVincenzo, D. P., and Loss, D. *Annals of Physics* **326**, 2793–2826 October (2011).



- [159] Shirakawa, T. and Yunoki, S. *Physical Review B* **90**(19) 11 (2014).
- [160] Cohen, D. *An Introduction to Hilbert Space and Quantum Logic*. Problem Books in Mathematics. Springer New York, (2012).
- [161] Martín-Delgado, M. A., Sierra, G., and Noack, R. M. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **32**(33), 6079 (1999).
- [162] Hewson, A. *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge Studies in Magnetism. Cambridge University Press, (1997).
- [163] Alécio, R. C. *Modelo de Potts desordenado em redes hierárquicas: estudo da fase condensada*. PhD thesis, Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, Recife-PE, 5 (2013).
- [164] Borisenko, V. and Ossicini, S. *What is What in the Nanoworld: A Handbook on Nanoscience and Nanotechnology*. Wiley, (2008).
- [165] Anderson, P. W. *American Association for the Advancement of Science* **177**, 393–396 aug (1972).
- [166] DICKSON, L. E. *Science* **33**(840), 188–189 (1911).
- [167] Hilbert, D., Lemmermeyer, F., Adamson, I., Schappacher, N., and Schoof, R. *The Theory of Algebraic Number Fields*. Springer Berlin Heidelberg, (2013).
- [168] Goldenfeld, N. *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*. Frontiers in physics. Addison-Wesley, Advanced Book Program, (1992).
- [169] Stückelberg, E. and Petermann, A. *Helv. Phys. Acta* **26**(499) (1953).
- [170] Gell-Mann, M. and Low, F. E. *Phys. Rev.* **95**, 1300–1312 Sep (1954).
- [171] Callan, C. G. *Phys. Rev. D* **2**, 1541–1547 Oct (1970).
- [172] Symanzik, K. *Communications in Mathematical Physics* **18**(3), 227–246 (1970).
- [173] Widom, B. *The Journal of Physical Chemistry* **100**(31), 13190–13199 (1996).
- [174] Felipe, J. and Fisher, F. M. *Metroeconomica* **54**(2-3), 208–262 (2003).

- [175] Wenzel, W. and Wilson, K. G. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 800–803 Aug (1992).
- [176] White, S. R. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863–2866 Nov (1992).
- [177] Dukelsky, J., Martín-Delgado, M. A., Nishino, T., and Sierra, G. *EPL (Europhysics Letters)* **43**(4), 457 (1998).
- [178] Bloch, F. *Zeitschrift fur Physik* **52**, 555–600 July (1929).
- [179] Noether, E. *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse* **1918**, 235–257 (1918).
- [180] Schwarzbach, B. and Kosmann-Schwarzbach, Y. *The Noether Theorems: Invariance and Conservation Laws in the Twentieth Century*. Sources and Studies in the History of Mathematics and Physical Sciences. Springer New York, (2010).
- [181] Mayr, D. and Süßmann, G. *Space, Time, and Mechanics: Basic Structures of a Physical Theory*. Synthese Library. Springer Netherlands, (2012).
- [182] Cassinelli, G., Vito, E., Levrero, A., and Lahti, P. *The Theory of Symmetry Actions in Quantum Mechanics: with an Application to the Galilei Group*. Lecture Notes in Physics. Springer Berlin Heidelberg, (2004).
- [183] Russo, F. *On the Geometry of Some Special Projective Varieties*. Lecture Notes of the Unione Matematica Italiana. Springer International Publishing, (2016).
- [184] Anderson, R. and Joshi, G. C. Technical report, July (1992).
- [185] Lafflorencie, N. and Poilblane, D. *Simulations of Pure and Doped Low-Dimensional Spin-1/2 Gapped Systems*, volume 645 of *Lecture Notes in Physics*, Berlin Springer Verlag. American Physical Society, (2004).
- [186] White, S. R. *Phys. Rev. B* **48**, 10345–10356 Oct (1993).
- [187] McCulloch, I. P. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2007**(10), P10014 (2007).
- [188] Anton, H. and Rorres, C. *Elementary Linear Algebra: Applications Version*. John Wiley & Sons, (2010).

- [189] Cho, Y. S., Kim, S.-W., Noh, J. D., Kahng, B., and Kim, D. *Phys. Rev. E* **82**, 042102 Oct (2010).
- [190] Schnack, J., Nojiri, H., Kögerler, P., Cooper, G. J. T., and Cronin, L. *Phys. Rev. B* **70**, 174420 Nov (2004).
- [191] Rojas, O., Strečka, J., and Lyra, M. L. *Physics Letters A* **377**, 920–926 May (2013).
- [192] Strečka, J., Rojas, O., Verkholyak, T., and Lyra, M. L. *Physical Review E* **89**(2), 022143 February (2014).
- [193] Wu, C. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 266404 Dec (2005).
- [194] Liang, Y.-Q., Wei, G.-Z., Ma, F.-C., and Song, G.-L. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **387**(18), 4513 – 4518 (2008).
- [195] Delica, T. and Leschke, H. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* **168**(2), 736 – 767 (1990).
- [196] Bashmakova, I., Smirnova, G., Shenitzer, A., and Cox, D. *The Beginnings and Evolution of Algebra*. Number v. 19 in Dolciani Mathematical Expositions. Mathematical Association of America, (2000).
- [197] Neumark, S. *Solution of Cubic and Quartic Equations*. Elsevier Science, (2014).
- [198] Garo, M. *Mathematics: quadratic equations.: How solve a quadratic equation*. Mathematics. Marilù Garo, (2014).
- [199] Griewank, A. and Walther, A. *Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation, Second Edition*. Society for Industrial and Applied Mathematics, (2008).
- [200] Horodecki, R., Horodecki, P., and Horodecki, M. *Physics Letters A* **200**(5), 340 – 344 (1995).
- [201] Varney, C. N., Sun, K., Galitski, V., and Rigol, M. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 077201 Aug (2011).
- [202] Shastry, B. S. and Sutherland, B. *Physica B+C* **108**(1), 1069 – 1070 (1981).

# Anexos

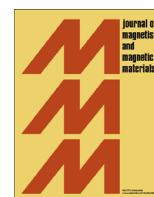
Anexo **A**

Primeiro Artigo Publicado



Contents lists available at ScienceDirect

## Journal of Magnetism and Magnetic Materials

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/jmmm](http://www.elsevier.com/locate/jmmm)Spin frustration of a spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube as an indispensable ground for thermal entanglement<sup>☆</sup>Jozef Strečka<sup>a,\*</sup>, Raphael Cavalcante Alécio<sup>b</sup>, Marcelo L. Lyra<sup>b</sup>, Onofre Rojas<sup>c</sup><sup>a</sup> Department of Theoretical Physics and Astrophysics, Faculty of Science, P.J. Šafárik University, Park Angelinum 9, 040 01 Košice, Slovakia<sup>b</sup> Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-970 Maceio-AL, Brazil<sup>c</sup> Departamento de Física, Universidade Federal de Lavras, 37200-000 Lavras-MG, Brazil

## ARTICLE INFO

## Article history:

Received 10 December 2015

Received in revised form

20 February 2016

Accepted 29 February 2016

Available online 2 March 2016

## Keywords:

Ising–Heisenberg tube

Spin frustration

Thermal entanglement

Chirality

## ABSTRACT

The spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube composed of the Heisenberg spin triangles mutually coupled through the Ising inter-triangle interaction is exactly solved in a zero magnetic field. By making use of the local conservation for the total spin on each Heisenberg spin triangle the model can be rigorously mapped onto a classical composite spin-chain model, which is subsequently exactly treated through the transfer-matrix method. The ground-state phase diagram, correlation functions, concurrence, Bell function, entropy and specific heat are examined in detail. It is shown that the spin frustration represents an indispensable ground for a thermal entanglement, which is quantified by the quantum concurrence. The specific heat displays diverse temperature dependences, which may include a sharp low-temperature peak mimicking a temperature-driven first-order phase transition. It is convincingly evidenced that this anomalous peak originates from massive thermal excitations from the doubly degenerate ground state towards an excited state with a high macroscopic degeneracy due to chiral degrees of freedom of the Heisenberg spin triangles.

© 2016 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

Quantum spin models in one dimension traditionally attract a great deal of attention, because they often exhibit unique magnetic properties closely connected to exotic quantum ground states [1–5]. Although all real-world magnetic materials are essentially three dimensional a lot of them can be effectively described by the notion of one-dimensional (1D) quantum Heisenberg spin models due to negligible interactions in other two spatial dimensions [5,6]. It should be emphasized that 1D Heisenberg spin models display more prominent quantum features than their higher-dimensional counterparts on account of reinforced quantum spin fluctuations. If the geometric spin frustration is absent, the fundamental properties of quantum Heisenberg chains basically depend on the parity of spin. The Heisenberg chains with half-odd-integer spins have a gapless excitation spectrum and algebraic

<sup>☆</sup>This work was financially supported by Ministry of Education of Slovak Republic provided under the VEGA Grant nos. 1/0331/15 and 1/0043/16, by the grants of the Slovak Research and Development Agency provided under the Contract nos. APVV-0097-12 and APVV-14-0073, and by the Brazilian grant agency CAPES. R.C. thanks CAPES for the financial support and Faculty of Science of P. J. Šafárik University in Košice for the afforded hospitality.

\* Corresponding author.

E-mail address: [jozef.strecka@upjs.sk](mailto:jozef.strecka@upjs.sk) (J. Strečka).

decay of correlations, while the Heisenberg chains with integer spins have an energy gap and exponential decay of correlations [1,7]. If the geometric spin frustration comes into play, however, the essential features of quantum Heisenberg chains may become more complex and possibilities for a low-energy spectrum are also broadened [2–5].

From an immense reservoir of 1D quantum spin systems, the spin-1/2 Heisenberg tubes have recently attracted much attention [8–23]. The term spin tube generally refers to a  $n$ -leg ( $n \geq 3$ ) spin ladder with periodic boundary conditions along a rung (inter-chain) direction. The antiferromagnetic coupling along the rung direction obviously causes a geometric spin frustration whenever the odd-numbered tube is considered. Owing to this fact, the antiferromagnetic spin-1/2 Heisenberg three-leg tube has a spin gap in contrast to the spin-1/2 Heisenberg three-leg ladder with an open boundary condition along the rung (inter-chain) direction [20–23]. The Lieb–Schultz–Mattis theorem [24] would suggest that the spin gap must be accompanied with at least doubly degenerate ground state with a spontaneous breaking of the translational symmetry since the unit cell consists of three spins. From the experimental point of view, 1D coordination polymers [(CuCl<sub>2</sub>tachH)<sub>3</sub>Cl]Cl<sub>2</sub> (tach = 1,3,5-triaminocyclohexane) [25–27] and Cu<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>·D<sub>8</sub>C<sub>4</sub>SO<sub>2</sub> [28] provide unique experimental realizations of a spin-1/2 Heisenberg three-leg and four-leg tube, respectively.

In the present work, we will exactly examine a spin frustration

and thermal entanglement of the spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube, which accounts for the Heisenberg intra-triangle and Ising inter-triangle interaction. This simplified but still highly non-trivial 1D quantum spin system is exactly tractable by adapting the approach worked out previously for the spin-1/2 Ising–Heisenberg tetrahedral chain [29,30]. The exotic quantum ground states along with a mutual interplay of spin frustration and quantum entanglement will be the main subject matter of our investigations. In particular, we will compare a frustration temperature [31] with a threshold temperature of thermal entanglement, which will be calculated from a disappearance of the concurrence serving as a measure of bipartite entanglement [32,33]. Besides, we will also calculate the non-locality function in order to test whether or not the Bell inequality is violated [34], because the nonlocality and entanglement capture different aspects of quantum correlations [36,35].

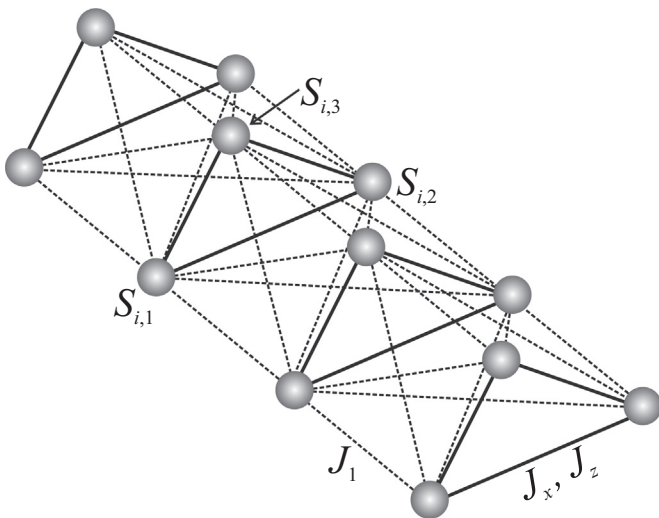
The organization of this paper is as follows. The spin-1/2 Ising–Heisenberg tube will be introduced in Section 2 along with basic steps of its exact analytical treatment. Section 3 deals with the most interesting results obtained for the ground-state phase diagram, correlation functions, spin frustration, bipartite entanglement, non-locality and specific heat. Finally, several concluding remarks are mentioned in Section 4.

## 2. Model and method

Let us consider the spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube with a cross-section of equilateral spin triangles, whereas the spins belonging to the same triangular unit are mutually coupled through the Heisenberg intra-triangle interaction and the spins from neighboring triangular units are coupled through the Ising inter-triangle interaction (see Fig. 1). The Hamiltonian of the spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube is then given by

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 \left[ J_x \left( \hat{S}_{i,j}^x \hat{S}_{i+1,j}^x + \hat{S}_{i,j}^y \hat{S}_{i+1,j}^y \right) + J_z \hat{S}_{i,j}^z \hat{S}_{i+1,j}^z \right] + J_1 \sum_{i=1}^N \left( \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{i,j}^z \right) \left( \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{i+1,j}^z \right), \quad (1)$$

where  $\hat{S}_{i,j}^\alpha$  ( $\alpha \in \{x, y, z\}$ ) mark spatial components of the standard spin-1/2 operator, the former subscript  $i$  determines a position of a



**Fig. 1.** A diagrammatic representation of spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube. Thick solid lines represent the XXZ Heisenberg intra-triangle interaction ( $J_x, J_z$ ), while thin broken lines correspond to the Ising inter-triangle coupling  $J_1$ .

triangular unit within a spin tube and the latter subscript  $j$  specifies a position of individual spin within a given triangular unit by imposing cyclic boundary conditions  $\hat{S}_{i,4}^\alpha \equiv \hat{S}_{i,1}^\alpha$ ,  $\hat{S}_{N+1,j}^\alpha \equiv \hat{S}_{1,j}^\alpha$  (see Fig. 1). The interaction terms  $J_x$  and  $J_z$  stand for the XXZ Heisenberg intra-triangle interaction between three spins from the same triangular unit and the coupling constant  $J_1$  labels the Ising inter-triangle interaction between all spins from neighboring triangular units.

The total Hamiltonian (1) of the spin-1/2 Ising–Heisenberg tube can be alternatively rewritten in terms of composite spin operators, which determine the total spin of the Heisenberg triangles and its z-component

$$\hat{\mathbf{T}}_i = \sum_{j=1}^3 \hat{\mathbf{S}}_{i,j} \quad \text{and} \quad \hat{T}_i^z = \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{i,j}^z. \quad (2)$$

It can be proved by inspection that the composite spin operators  $\hat{\mathbf{T}}_i^2$  and  $\hat{T}_i^z$  commute with the total Hamiltonian (1), i.e.  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{T}}_i^2] = [\hat{H}, \hat{T}_i^z] = 0$ , which means that the total spin of the Heisenberg triangles and its z-component represent conserved quantities with well defined quantum numbers. Consequently, the eigenvalues of the total Hamiltonian (1) can be related to the eigenvalues of the composite spin operators  $\hat{\mathbf{T}}_i^2$  and  $\hat{T}_i^z$ . Using the spin identity  $(\hat{T}_i^z)^2 = \frac{3}{4} - 2(\hat{S}_{i,1}^\alpha \hat{S}_{i,2}^\alpha + \hat{S}_{i,2}^\alpha \hat{S}_{i,3}^\alpha + \hat{S}_{i,3}^\alpha \hat{S}_{i,1}^\alpha)$ , the total Hamiltonian (1) can be rewritten into the following form:

$$\hat{H} = -\frac{3N}{8}(2J_x + J_z) + \sum_{i=1}^N \hat{H}_i, \quad (3)$$

which depends on the Hamiltonian  $\hat{H}_i$  of two subsequent triangular unit cells

$$\hat{H}_i = J_1 \hat{T}_i^z \hat{T}_{i+1}^z + \frac{J_x}{4} (\hat{\mathbf{T}}_i^2 + \hat{\mathbf{T}}_{i+1}^2) + \frac{J_z - J_x}{4} \left[ (\hat{T}_i^z)^2 + (\hat{T}_{i+1}^z)^2 \right]. \quad (4)$$

The first term in Eq. (3) is the less important constant term and the second one is expressed as a sum over the symmetrically defined cell Hamiltonians  $\hat{H}_i$ , which depend according to Eq. (4) on the composite spin operators from two neighboring triangular units.

The eigenvalues of the composite spin operators  $\hat{\mathbf{T}}_i^2$  and  $\hat{T}_i^z$  are quantized according to the rules  $T_i(T_i + 1)$  with  $T_i = 1/2$  or  $3/2$  and, respectively,  $T_i^z = -T_i, -T_i + 1, \dots, T_i$ . From this point of view, the spin-1/2 Ising–Heisenberg tube defined by the Hamiltonian (1) can be rigorously mapped onto some classical composite spin-chain model, which can be further treated by the transfer-matrix method [37]. Owing to a validity of the commutation relation between the cell Hamiltonians  $[\hat{H}_i, \hat{H}_j] = 0$ , the partition function can be factorized into the following form:

$$\begin{aligned} Z &= \exp \left[ \frac{3N\beta}{8}(2J_x + J_z) \right] \text{Tr} \prod_{i=1}^N \exp(-\beta \hat{H}_i) \\ &= \exp \left[ \frac{3N\beta}{8}(2J_x + J_z) \right] \sum_{\{T_i, T_i^z\}} \prod_{i=1}^N W(T_i, T_i^z; T_{i+1}, T_{i+1}^z) \\ &= \exp \left[ \frac{3N\beta}{8}(2J_x + J_z) \right] \text{Tr} W^N, \end{aligned} \quad (5)$$

where  $\beta = 1/(k_B T)$ ,  $k_B$  is Boltzmann's constant,  $T$  is the absolute temperature, and the summation  $\sum_{\{T_i, T_i^z\}}$  runs over all possible values of the quantum spin numbers  $T_i$  and  $T_i^z$ . The expression  $W = \exp(-\beta \hat{H}_i)$ , which depends on the composite spin operators from two neighboring triangular units, can be alternatively viewed as the transfer matrix with the following elements

$$W(T_i, T_i^z, T_{i+1}, T_{i+1}^z) = \langle T_i, T_i^z | e^{-\beta \hat{H}_i} | T_{i+1}, T_{i+1}^z \rangle$$

$$= \begin{pmatrix} x^3 y^9 z^9 & x^5 y^5 z^3 & x^5 y^5 z^{-3} & x^3 y^9 z^{-9} & x^2 y^5 z^3 & x^2 y^5 z^{-3} & x^2 y^5 z^3 & x^2 y^5 z^{-3} \\ x^5 y^5 z^3 & x^7 y z & x^7 y z^{-1} & x^5 y^5 z^{-3} & x^4 y z & x^4 y z^{-1} & x^4 y z & x^4 y z^{-1} \\ x^5 y^5 z^{-3} & x^7 y z^{-1} & x^7 y z & x^5 y^5 z^3 & x^4 y z^{-1} & x^4 y z & x^4 y z^{-1} & x^4 y z \\ x^3 y^9 z^{-9} & x^5 y^5 z^{-3} & x^5 y^5 z^3 & x^3 y^9 z^9 & x^2 y^5 z^{-3} & x^2 y^5 z^3 & x^2 y^5 z^{-3} & x^2 y^5 z^3 \\ x^2 y^5 z^3 & x^4 y z & x^4 y z^{-1} & x^2 y^5 z^{-3} & x y z & x y z^{-1} & x y z & x y z^{-1} \\ x^2 y^5 z^{-3} & x^4 y z^{-1} & x^4 y z & x^2 y^5 z^3 & x y z^{-1} & x y z & x y z^{-1} & x y z \\ x^2 y^5 z^3 & x^4 y z & x^4 y z^{-1} & x^2 y^5 z^{-3} & x y z & x y z^{-1} & x y z & x y z^{-1} \\ x^2 y^5 z^{-3} & x^4 y z^{-1} & x^4 y z & x^2 y^5 z^3 & x y z^{-1} & x y z & x y z^{-1} & x y z \end{pmatrix} \quad (6)$$

where  $x = \exp(-\beta J_x/4)$ ,  $y = \exp(-\beta J_z/8)$  and  $z = \exp(-\beta J_1/4)$ . As usual, the partition function is in the thermodynamic limit  $N \rightarrow \infty$  solely determined by the largest eigenvalue of the transfer matrix  $W$  given by Eq. (6). By inspection, four out of eight transfer-matrix eigenvalues equal zero ( $\lambda_5 = \lambda_6 = \lambda_7 = \lambda_8 = 0$ ), because the second, fifth and seventh (third, sixth and eighth) rows are linearly dependent. The other four eigenvalues can be found by solving two quadratic equations

$$(\lambda^2 - a\lambda + b)(\lambda^2 - c\lambda + d) = 0 \quad (7)$$

with the coefficients  $a$ ,  $b$ ,  $c$  and  $d$  given by

$$\begin{aligned} a &= xy[x^2 y^8 (z^9 + z^{-9}) + (z + z^{-1})(2 + x^6)], \\ b &= x^4 y^{10} (2 + x^6) [(z + z^{-1})(z^9 + z^{-9}) - (z^3 + z^{-3})^2], \\ c &= xy[x^2 y^8 (z^9 - z^{-9}) + (z - z^{-1})(2 + x^6)], \\ d &= x^4 y^{10} (2 + x^6) [(z - z^{-1})(z^9 - z^{-9}) - (z^3 - z^{-3})^2]. \end{aligned} \quad (8)$$

The remaining four eigenvalues of the transfer matrix (6) can be therefore acquired by solving two quadratic equations (7)

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= x^3 y^9 \cosh\left(\frac{9\beta J_1}{4}\right) + xy(2 + x^6) \cosh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right) \pm \sqrt{D_1}, \\ \lambda_{3,4} &= x^3 y^9 \sinh\left(\frac{9\beta J_1}{4}\right) + xy(2 + x^6) \sinh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right) \pm \sqrt{D_2}, \end{aligned} \quad (9)$$

where

$$\begin{aligned} D_1 &= \left[ x^3 y^9 \cosh\left(\frac{9\beta J_1}{4}\right) - xy(2 + x^6) \cosh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right) \right]^2 \\ &\quad + 4x^4 y^{10} (2 + x^6) \cosh^2\left(\frac{3\beta J_1}{4}\right), \\ D_2 &= \left[ x^3 y^9 \sinh\left(\frac{9\beta J_1}{4}\right) - xy(2 + x^6) \sinh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right) \right]^2 \\ &\quad + 4x^4 y^{10} (2 + x^6) \sinh^2\left(\frac{3\beta J_1}{4}\right). \end{aligned} \quad (10)$$

In thermodynamic limit  $N \rightarrow \infty$ , the Helmholtz free energy per unit cell is determined just by the largest transfer-matrix eigenvalue  $\lambda_{\max} = \lambda_+$

$$f = -\beta^{-1} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = -\frac{3(2J_x + J_z)}{8} - \beta^{-1} \ln \lambda_+. \quad (11)$$

After substituting the largest transfer-matrix eigenvalue (9) into Eq. (11) and straightforward algebraic manipulations one obtains an explicit form of the Helmholtz free energy

$$f = -\beta^{-1} \ln(g_1 + g_2 + g_4), \quad (12)$$

which is expressed in terms of the newly defined functions  $g_1$ – $g_4$  given by

$$\begin{aligned} g_1 &= \exp\left(-\frac{3\beta J_z}{4}\right) \cosh\left(\frac{9\beta J_1}{4}\right), \\ g_2 &= \exp\left[\frac{\beta}{4}(J_z + 2J_x)\right] \left[ 2 + \exp\left(-\frac{3\beta J_x}{2}\right) \right] \cosh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right), \\ g_3 &= \exp\left[\frac{\beta}{2}(J_x - J_z)\right] \left[ 2 + \exp\left(-\frac{3\beta J_x}{2}\right) \right] \cosh^2\left(\frac{3\beta J_1}{4}\right), \\ g_4 &= \sqrt{(g_1 - g_2)^2 + 4g_3}. \end{aligned} \quad (13)$$

Now, let us calculate pair correlation functions between two spins from the same Heisenberg triangle. Both different spatial components of the pair correlation function between two spins from the same Heisenberg triangle can be calculated by differentiating the Helmholtz free energy (12) with respect to the coupling constant  $J_z$  or  $J_x$ . This procedure yields for the respective spatial components of the pair correlation function the following simple expressions

$$\begin{aligned} C_{11}^{zz} &= \langle \hat{S}_{j,i}^z \hat{S}_{j+1,i}^z \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ \hat{S}_{j,i}^z \hat{S}_{j+1,i}^z \exp(-\beta \hat{H}) \right] \\ &= \frac{1}{4} \frac{(g_1 - g_2) \left( g_1 + \frac{g_2}{3} \right) + \frac{4g_3}{3} + \left( g_1 - \frac{g_2}{3} \right) g_4}{(g_1 - g_2)^2 + 4g_3 + (g_1 + g_2)g_4}, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} C_{11}^{xx} &= \langle \hat{S}_{j,i}^x \hat{S}_{j+1,i}^x \rangle = \langle \hat{S}_{j,i}^y \hat{S}_{j+1,i}^y \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ \hat{S}_{j,i}^x \hat{S}_{j+1,i}^x \exp(-\beta \hat{H}) \right] \\ &= \frac{1}{6} \frac{g_5 (g_1 - g_2) - 2g_6 - g_4 g_5}{(g_1 - g_2)^2 + 4g_3 + (g_1 + g_2)g_4}, \end{aligned} \quad (15)$$

which contain two new functions  $g_5$  and  $g_6$  given by

$$\begin{aligned} g_5 &= \exp\left[\frac{\beta}{4}(J_z + 2J_x)\right] \left[ 1 - \exp\left(-\frac{3\beta J_x}{2}\right) \right] \cosh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right), \\ g_6 &= \exp\left[\frac{\beta}{2}(J_x - J_z)\right] \left[ 1 - \exp\left(-\frac{3\beta J_x}{2}\right) \right] \cosh^2\left(\frac{3\beta J_1}{4}\right), \end{aligned} \quad (16)$$

The  $z$ -component of the pair correlation function between two spins from the neighboring Heisenberg triangles can in turn be calculated by differentiating the Helmholtz free energy (11) with respect to the coupling constant  $J_1$

$$\begin{aligned} C_{12}^{zz} &= \langle \hat{S}_{j,i}^z \hat{S}_{j,i+1}^z \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ \hat{S}_{j,i}^z \hat{S}_{j,i+1}^z \exp(-\beta \hat{H}) \right] \\ &= -\frac{1}{4} \frac{(g_1 - g_2) \left( g_7 + \frac{g_8}{3} \right) + \frac{g_9}{3} + \left( g_7 + \frac{g_8}{9} \right) g_4}{(g_1 - g_2)^2 + 4g_3 + (g_1 + g_2)g_4}, \end{aligned} \quad (17)$$

whereas the functions  $g_7$ – $g_9$  are defined as

$$\begin{aligned} g_7 &= \exp\left(-\frac{3\beta J_z}{4}\right) \sinh\left(\frac{9\beta J_1}{4}\right), \\ g_8 &= \exp\left[\frac{\beta}{4}(J_z + 2J_x)\right] \left[ 2 + \exp\left(-\frac{3\beta J_x}{2}\right) \right] \sinh\left(\frac{\beta J_1}{4}\right), \\ g_9 &= \exp\left[\frac{\beta}{2}(J_x - J_z)\right] \left[ 2 + \exp\left(-\frac{3\beta J_x}{2}\right) \right] \sinh\left(\frac{3\beta J_1}{2}\right). \end{aligned} \quad (18)$$

At this stage, one may employ two spatial components of the pair correlation function (14) and (15) between the spins from the same Heisenberg triangle in order to calculate the concurrence [33]

$$C = \max \left\{ 0; 4|C_{xx}| - \left| \frac{1}{2} + 2C_{zz} \right| \right\} \quad (19)$$

and the Bell function [34]



$$B = 8 \max \left\{ \sqrt{C_{xx}^2 + C_{zz}^2}; \sqrt{2C_{xx}^2} \right\}, \quad (20)$$

which may serve as a measure of bipartite entanglement and quantum non-locality at zero as well as non-zero temperature. The Heisenberg spins from the same triangular unit display a thermal entanglement just if the concurrence is greater than zero, i.e.  $C > 0$ , otherwise they become disentangled. On the other hand, the violation of the Bell inequality  $B \leq 2$  can be used in order to prove a non-local character of quantum correlations. The obtained exact results for the thermal entanglement will be confronted with the ones for non-locality, because the entanglement and non-locality capture closely related yet independent features of quantum correlations [34,36].

### 3. Results and discussion

Let us proceed to a discussion of the most interesting results for the spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube by considering the particular case with the antiferromagnetic inter-triangle interaction  $J_1 > 0$ , which will henceforth serve as an energy unit  $J_1 = 1$  (the Boltzmann’s constant is also set to unity  $k_B = 1$  for easy notation). It should be mentioned that another particular case with the ferromagnetic inter-triangle interaction  $J_1 < 0$  behaves quite analogously, because the spin states on each second Heisenberg triangle are merely inverted under the transformation  $J_1 \rightarrow -J_1$ .

#### 3.1. Ground state

A diagonal form of the Hamiltonian (4) can be straightforwardly used in order to obtain all possible ground states, since the lowest-energy eigenstate of the cell Hamiltonian (4) can be readily extended to the whole spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube. Consequently, the ground state of the spin-1/2 Ising–Heisenberg tube can be written as a tensor product over the lowest-energy eigenstate of the cell Hamiltonian (4). One finds by inspection just three different ground states, namely, the classical antiferromagnetic phase (CAF)

$$|CAF\rangle = \prod_{j=1}^{N/2} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j-1} \otimes |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle_{2j}, \quad (21)$$

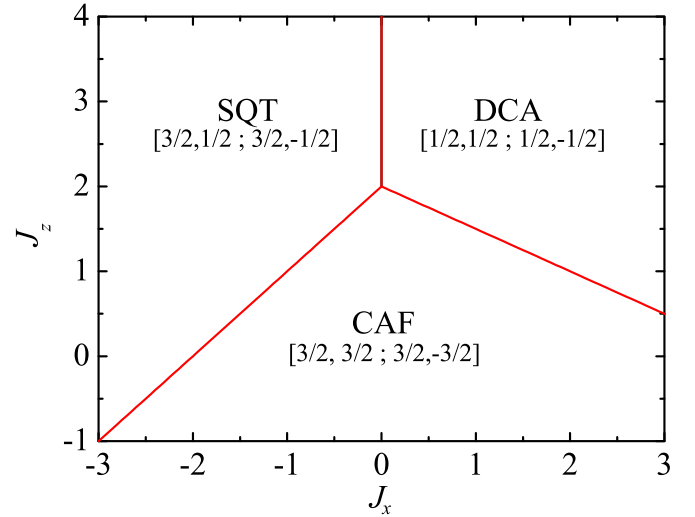
the symmetric quantum trimerized phase (SQT)

$$|SQT\rangle = \prod_{j=1}^{N/2} \frac{1}{\sqrt{3}} (|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle)_{2j-1} \otimes \frac{1}{\sqrt{3}} (|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle)_{2j}, \quad (22)$$

and the macroscopically degenerate chiral antiferromagnetic phase (DCA)

$$|DCA\rangle = \prod_{j=1}^{N/2} \left\{ \frac{1}{\sqrt{3}} (|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{i\frac{2\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{i\frac{4\pi}{3}} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle)_{2j-1} \right. \\ \left. \frac{1}{\sqrt{3}} (|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{i\frac{4\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{i\frac{2\pi}{3}} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle)_{2j-1} \right. \\ \left. \frac{1}{\sqrt{3}} (|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{i\frac{2\pi}{3}} |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + e^{i\frac{4\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle)_{2j} \right. \\ \left. \frac{1}{\sqrt{3}} (|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{i\frac{4\pi}{3}} |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + e^{i\frac{2\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle)_{2j} \right\}. \quad (23)$$

Owing to the time-reversal symmetry, the alternative



**Fig. 2.** The ground-state phase diagram of the spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube in the  $J_x - J_z$  plane. The numbers quoted in square brackets determine the total spin and its z-component on two consecutive Heisenberg triangles [ $T_{2i-1}, T_{2i-1}^z; T_{2i}, T_{2i}^z$ ].

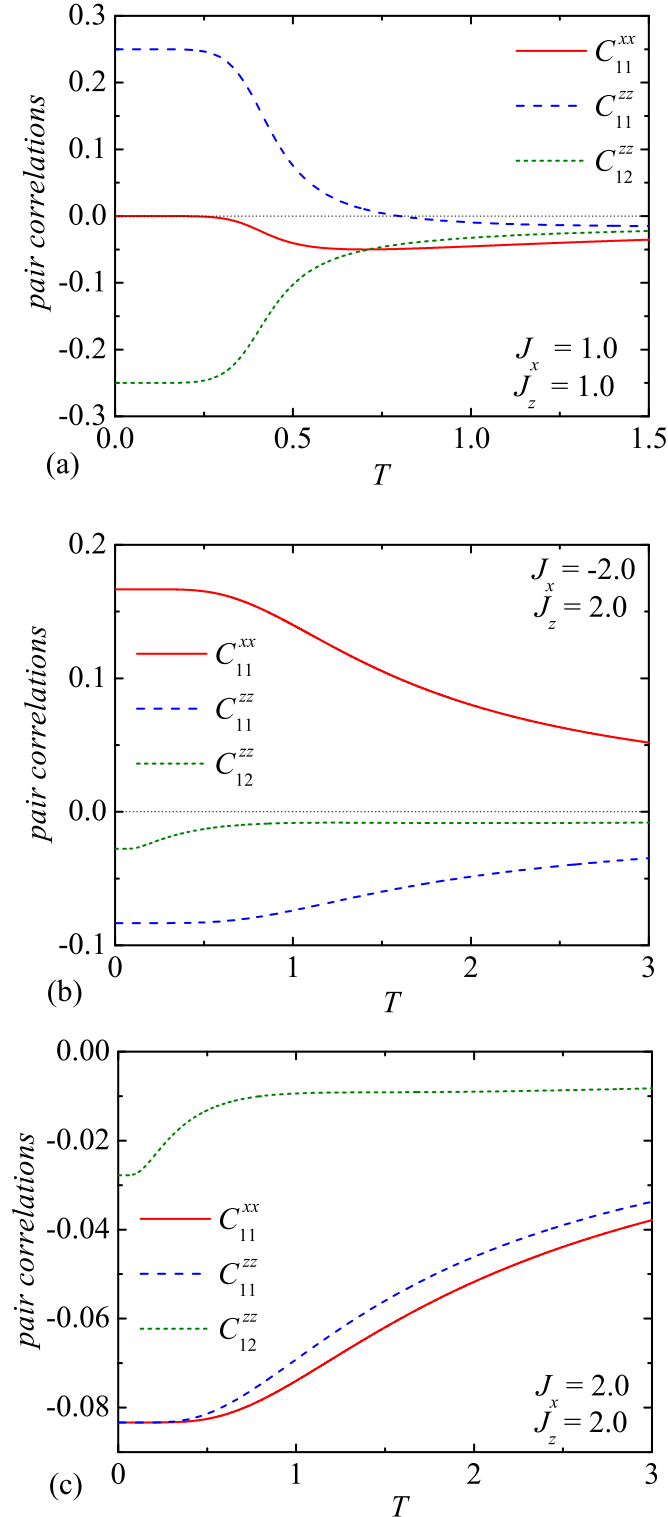
representation of the ground states CAF, SQT and DCA can be obtained from Eqs. (21)–(23) by inter-changing the eigenkets on odd and even Heisenberg triangles, respectively. Hence, it follows that the ground states CAF and SQT are two-fold degenerate in contrast to the ground state DCA, which is  $2 \times 2^N$  degenerate due to the time-reversal symmetry and two chiral degrees of freedom on each Heisenberg spin triangle. The spin arrangement inherent to the three available ground states is consistent with the following asymptotic values of the pair correlation functions as calculated from Eqs. (14), (15) and (17) in a zero-temperature limit

$$\begin{aligned} \text{CAF: } C_{11}^{xx} &= 0, & C_{11}^{zz} &= \frac{1}{4}, & C_{12}^{zz} &= -\frac{1}{4}; \\ \text{SQT: } C_{11}^{xx} &= \frac{1}{6}, & C_{11}^{zz} &= -\frac{1}{12}, & C_{12}^{zz} &= -\frac{1}{36}; \\ \text{DCA: } C_{11}^{xx} &= -\frac{1}{12}, & C_{11}^{zz} &= -\frac{1}{12}, & C_{12}^{zz} &= -\frac{1}{36}. \end{aligned} \quad (24)$$

The ground-state phase diagram involving all three available ground states is depicted in Fig. 2. The CAF phase becomes the ground state in a parameter space delimited by the conditions  $J_z < 2 + J_x$  and  $J_z < 2 - J_x/2$ , which are consistent with the ferromagnetic Heisenberg interaction ( $J_z < 0$ ) or the sufficiently weak antiferromagnetic Heisenberg interaction ( $J_z < 2$ ). If the conditions  $J_x > 0$  and  $J_z > 2 - J_x/2$  are met, however, the spin frustration arising out from the stronger antiferromagnetic Heisenberg interaction gives rise to the macroscopically degenerate DCA ground state with two (right- or left-hand-side) chiral degrees of freedom on each Heisenberg triangle. As long as the conditions  $J_x < 0$  and  $J_z > 2 + J_x$  are fulfilled, the SQT phase with a regular alternation of the symmetric quantum superposition of three up-up-down and down-down-up states on odd and even triangles (or vice versa) becomes the relevant ground state.

#### 3.2. Correlation functions

To gain an overall insight into a character of spin arrangements emerging within the individual ground states, let us explore in detail temperature dependences of all calculated pair correlation functions. The pair correlation functions are plotted against temperature in Fig. 3(a)–(c) for three different sets of the interaction parameters, which drive the investigated system towards the CAF, SQT and DCA ground states, respectively. It is quite clear from Fig. 3(a) that z-components of the spins on the neighboring Heisenberg triangles are perfectly anticorrelated at zero



**Fig. 3.** The pair correlation functions as a function of temperature for the coupling constants supporting three different ground states: (a)  $J_x=1, J_z=1$  (CAF phase); (b)  $J_x = -2, J_z=2$  (SQT phase); (c)  $J_x=2, J_z=2$  (DCA phase).

temperature, whereas a relative strength of the antiferromagnetic correlation gradually decreases with increasing temperature. Interestingly, the longitudinal correlation function between the spins from the same Heisenberg triangle shows a peculiar crossover at a so-called frustration temperature  $T_f$ , at which z-components of the spins become completely uncorrelated (i.e. the relevant correlation function equals zero). The longitudinal

correlation between the spins from the same Heisenberg triangle would suggest that the z-components of the spins are ferromagnetically correlated below the frustration temperature ( $T < T_f$ ) and antiferromagnetically correlated above it ( $T > T_f$ ). The transverse correlation function between the spins from the same Heisenberg triangle is zero at absolute zero temperature due to a classical character of the CAF ground state, but it implies antiferromagnetic (ferromagnetic) correlation at non-zero temperatures provided that the x-component of the Heisenberg coupling is antiferromagnetic (ferromagnetic).

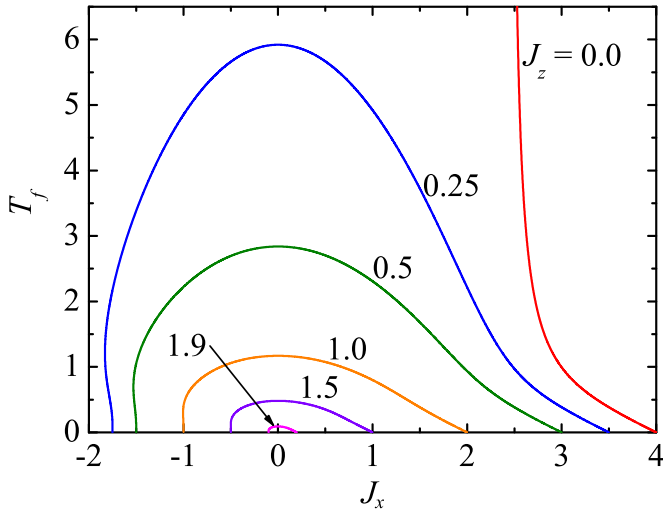
Fig. 3 (b) demonstrates thermal variations of the correlation functions, which are quite typical for the SQT ground state. The correlation function between the spins from the same Heisenberg triangle serves in evidence of the antiferromagnetic (ferromagnetic) correlation in a longitudinal (transverse) direction, whereas a relative strength of the ferromagnetic transverse correlation is slightly stronger than that of the antiferromagnetic longitudinal correlation. Furthermore, the z-components of the spins from the neighboring Heisenberg triangles are antiferromagnetically correlated within the SQT phase.

Last but not least, the correlation functions plotted in Fig. 3 (c) illustrate typical temperature dependences for the DCA ground state. As one can see, the longitudinal and transverse correlation functions between the spins from the same Heisenberg triangle are antiferromagnetic. While the longitudinal and transverse correlation are of equal strength at zero temperature, the transverse correlation overwhelms over the longitudinal one at non-zero temperatures. It is noteworthy that the z-components of the spins from the neighboring Heisenberg triangles are always antiferromagnetically correlated when the investigated spin system starts from the DCA ground state.

### 3.3. Spin frustration

It is obvious from previous discussions that the SQT and DCA ground states have frustrated character in contrast to the unfrustrated CAF ground state. According to the frustration concept developed by Toulouse [38], the spin system is said to be geometrically frustrated if a product of signs of the exchange couplings along an elementary plaquette becomes negative. Analogously, the product of signs of the pair correlation functions along an elementary plaquette can be used as another useful criterion for testing whether or not a spin system is frustrated at finite temperatures [31]. Hence, the antiferromagnetic (negative) correlation function between z-components of the spins from the same Heisenberg triangle indeed verifies the frustrated character of the SQT and DCA phases at non-zero temperatures [see Fig. 3(b) and (c)]. On the other hand, the longitudinal correlation function between the spins from the same Heisenberg triangle shown in Fig. 3(a) changes its sign from positive (at lower temperatures) to negative (at higher temperatures), which confirms an outstanding thermally activated spin frustration above the unfrustrated CAF ground state on assumption that the antiferromagnetic intra-triangle coupling  $J_2 > 0$  is considered.

With this in mind, it might be quite interesting to investigate how the thermally activated spin frustration above the unfrustrated CAF ground state depends on a relative strength of the Heisenberg intra-triangle interaction. For this purpose, we have depicted in Fig. 4 typical dependences of the frustration temperature  $T_f$  on the transverse component  $J_x$  of the Heisenberg coupling for a few fixed values of its longitudinal component  $J_z$ . It is worthwhile to recall that z-components of the spins from the same Heisenberg triangle are ferromagnetically (antiferromagnetically) correlated below (above) the frustration temperature  $T_f$ . In this regard, the spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube is free of frustration inside of the region bounded from above by the line of frustration temperatures,



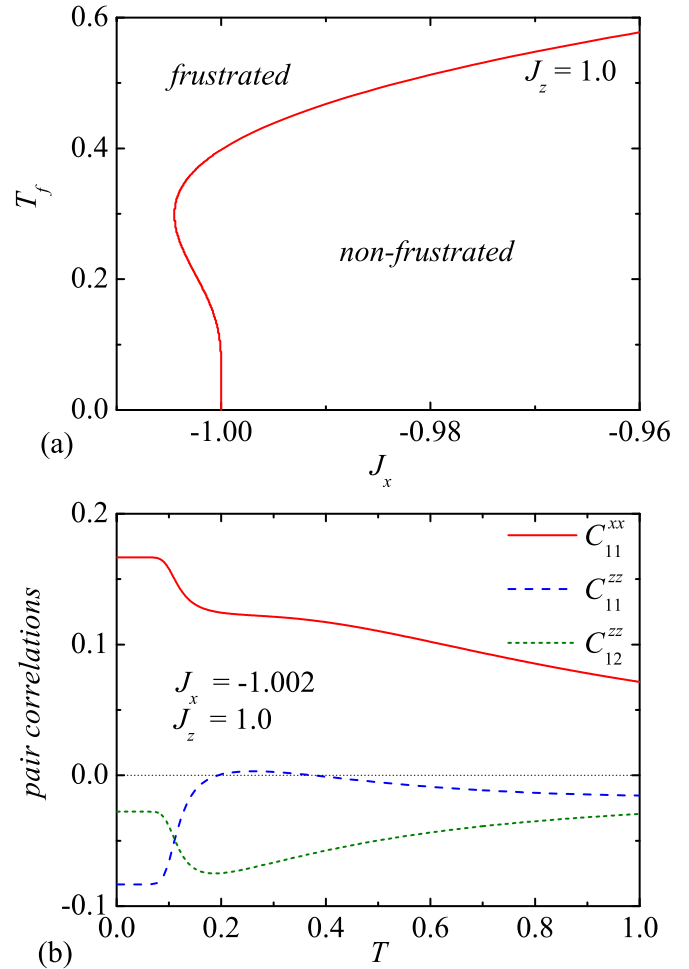
**Fig. 4.** The frustration temperature  $T_f$  as a function of the transverse component of the Heisenberg coupling  $J_x$  for a few fixed values of its longitudinal component  $J_z$ .

while it becomes frustrated outside of this region. It is evident from Fig. 4 that the unfrustrated region gradually diminishes upon increasing of the longitudinal component of the Heisenberg coupling until it completely disappears for any  $J_z \geq 2$ . This is in agreement with the absence of the unfrustrated CAF phase in the parameter region  $J_z \geq 2$ . It should be pointed out, moreover, that the upper- and lower-edge boundaries of the unfrustrated region exactly coincide at zero temperature with the ground-state boundaries CAF-DCA and CAF-SQT, respectively (cf. Fig. 4 with Fig. 2).

Another interesting point to observe from Fig. 4 is that the frustration temperature exhibits a notable reentrant behavior near its lower edge closely connected to the ground-state boundary between the CAF and SQT phases. To clarify this issue in a more detail, we have plotted in Fig. 5 typical dependence of the frustration temperature in a close neighborhood of its lower-edge boundary [Fig. 5(a)] along with the corresponding thermal variations of the correlation functions [Fig. 5(b)]. If the transverse component of the Heisenberg interaction is selected sufficiently close but slightly below the ground-state boundary CAF-SQT, then, the longitudinal correlation function between the spins from the same Heisenberg triangle actually shows a weak ferromagnetic correlation within a relatively narrow range of moderate temperatures and antiferromagnetic correlation out of this temperature range.

### 3.4. Thermal entanglement

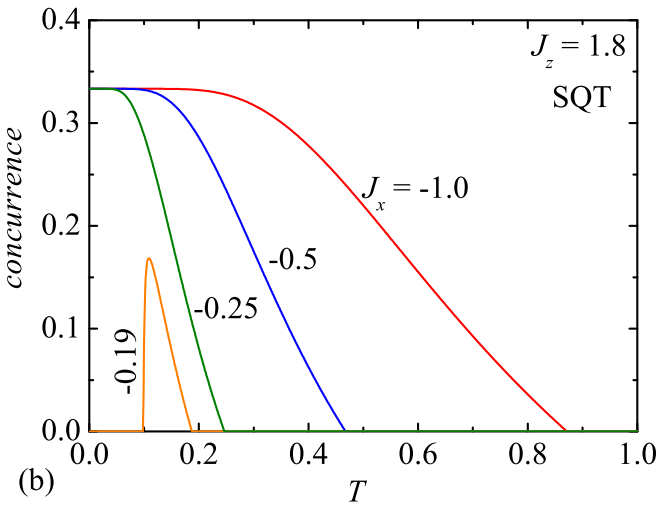
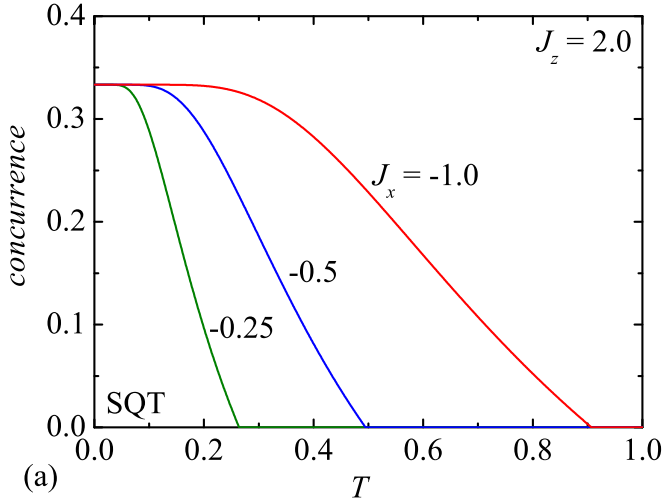
The concurrence, as calculated from Eq. (19), represents a feasible measure of bipartite quantum entanglement at zero as well as non-zero temperatures. Although the absence of quantum correlations in the CAF ground state could be anticipated on the grounds of the fully classical character of this phase, it is somewhat more surprising that the concurrence equals zero also within the DCA ground state. According to this, the SQT phase is the only ground state for which the calculated concurrence  $C = 1/3$  at zero temperature indicates the substantial but not full quantum entanglement. To clarify the effect of temperature upon the bipartite entanglement, we have plotted in Fig. 6 the concurrence against temperature for two different values of the longitudinal component  $J_z$  of the Heisenberg intra-triangle coupling and several values of its transverse component  $J_x$ . In agreement with the general expectations, thermal fluctuations gradually destroy the quantum entanglement, i.e. the concurrence generally decreases upon increasing temperature until it finally disappears above a certain



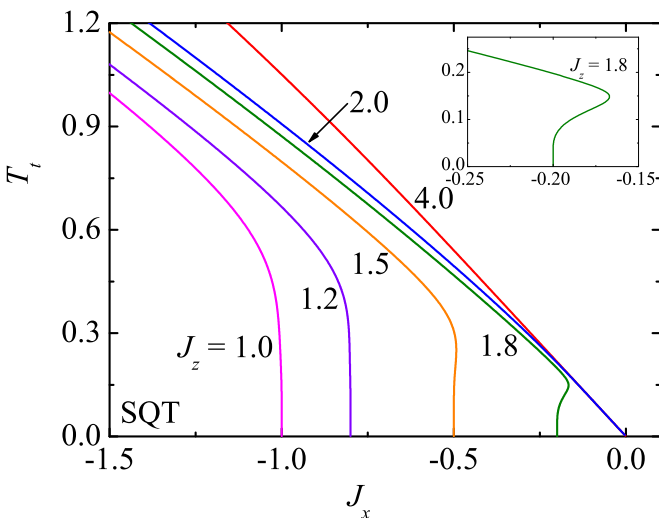
**Fig. 5.** (a) A reentrant behavior of the frustrated temperature  $T_f$  in a vicinity of the ground-state phase boundary CAF-SQT for the particular case  $J_z=1.0$ ; (b) temperature dependences of the correlation functions for the parameter set  $J_x = -1.002$  and  $J_z=1.0$  serving in evidence of the reentrant behavior (a thin dotted line at zero is guide for eyes only).

temperature referred to as the threshold temperature  $T_t$ . Apart from this standard dependence, one may also found a peculiar reentrant behavior of the concurrence, which is illustrated in Fig. 6 (b) on the particular example with  $J_z=1.8$  and  $J_x = -0.19$ . Under this circumstance, the concurrence evolves from zero just at a certain lower threshold temperature, then it shows a peculiar thermally induced increase followed by a successive thermally induced decrease until it completely vanishes at an upper threshold temperature.

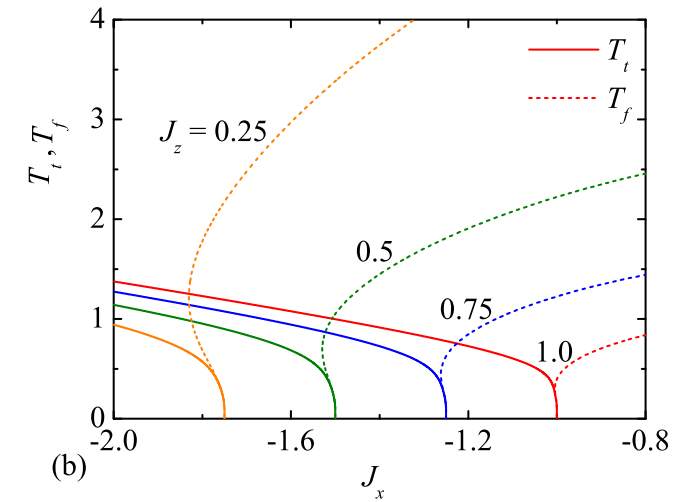
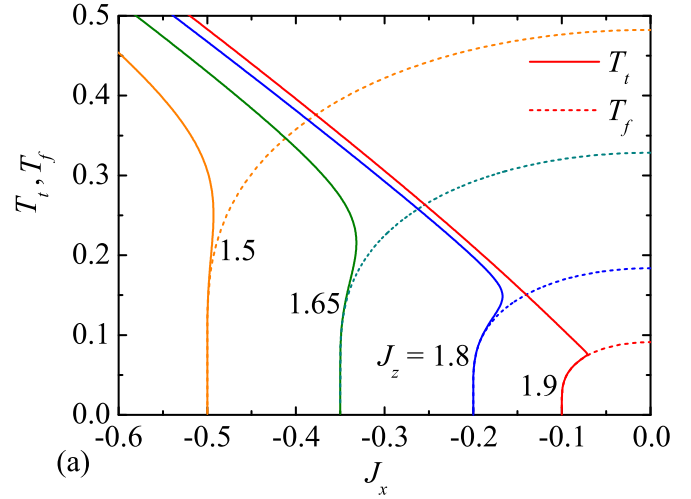
To gain an overall insight into the entangled part of the parameter region, we have depicted in Fig. 7 the threshold temperature as a function of the transverse component  $J_x$  of the Heisenberg intra-triangle coupling for several fixed values of its longitudinal component  $J_z$ . The spin-1/2 Ising–Heisenberg tube is entangled inside of the parameter region bounded from above by displayed lines of the threshold temperature, where the concurrence as a measure of the thermal entanglement is non-zero. If the longitudinal component of the antiferromagnetic Heisenberg coupling is sufficiently strong  $J_z \geq 2$ , then, the threshold temperature monotonically decreases with increasing its transverse component  $J_x$  until it tends to zero at  $J_x=0$ . On the other hand, the dependence of the threshold temperature terminates for  $J_z < 2$  at the ground-state phase boundary between the SQT and CAF phases at  $J_x = J_z - 2$ . Moreover, it can be observed from Fig. 7 that the



**Fig. 6.** Thermal variations of the concurrence for several values of the transverse component of the Heisenberg intra-triangle coupling  $J_x$  and two different values of its longitudinal component: (a)  $J_z=2.0$ ; (b)  $J_z=1.8$ .



**Fig. 7.** The threshold temperature  $T_t$  as a function of the transverse component of the Heisenberg coupling  $J_x$  for a few fixed values of its longitudinal component  $J_z$ . The inset shows a detail from the reentrant region for the particular case  $J_z=1.8$ .

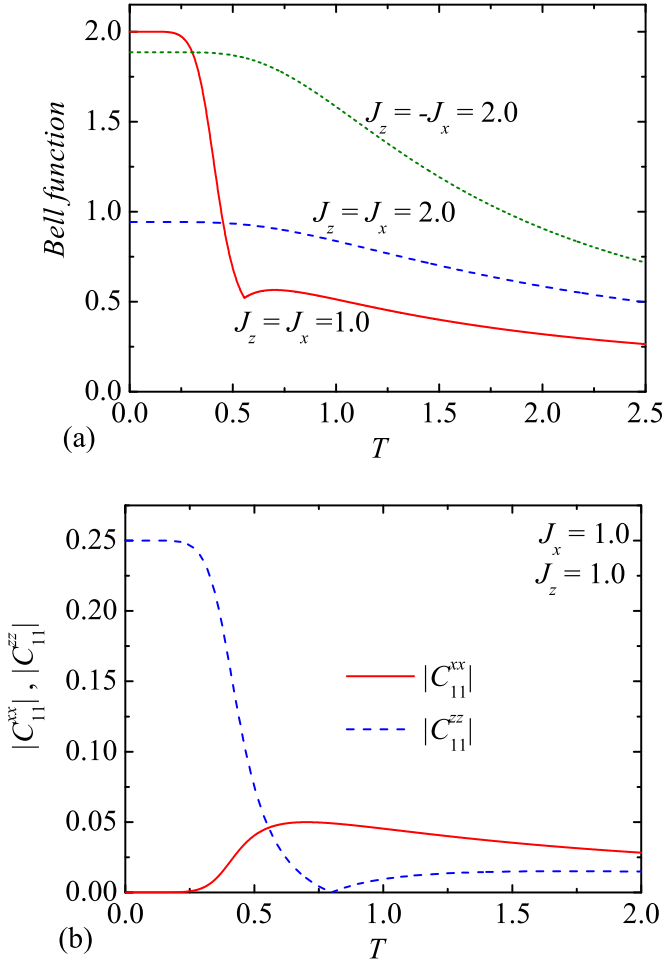


**Fig. 8.** The dependence of threshold (solid lines) and frustration (broken lines) temperatures on the transverse component of the Heisenberg intra-triangle coupling  $J_x$  for several fixed values of its longitudinal component  $J_z$ . The panel (a) shows reentrant behavior of the threshold temperature and the panel (b) reentrant behavior of the frustration temperature.

threshold temperature shows the most striking dependence with a pronounced reentrant region when the longitudinal component of the Heisenberg intra-triangle interaction is close enough but slightly below  $J_z \approx 2$ .

### 3.5. Frustration vs. entanglement

At this stage, it might be of particular interest to investigate a mutual interplay between the thermally activated spin frustration and entanglement, which do not bear at first sight any direct relation. To this end, we have plotted in Fig. 8 the threshold and frustration temperature against the transverse component of the Heisenberg intra-triangle coupling  $J_x$  for several fixed values of its longitudinal component  $J_z$ . It is quite apparent from this comparison that the threshold and frustration temperatures coincide at low enough temperatures, because they both converge to the identical zero-temperature asymptotic limit though they show completely different behavior at higher temperatures. It can be also understood from Fig. 8 that the thermal entanglement occurs just outside of the parameter region bounded by the line of frustration temperatures, which means that the spin frustration is in the spin-1/2 Ising–Heisenberg tube indispensable for a presence of the thermal entanglement. Another interesting point is that the reentrance in the threshold temperatures gives rise to the thermal

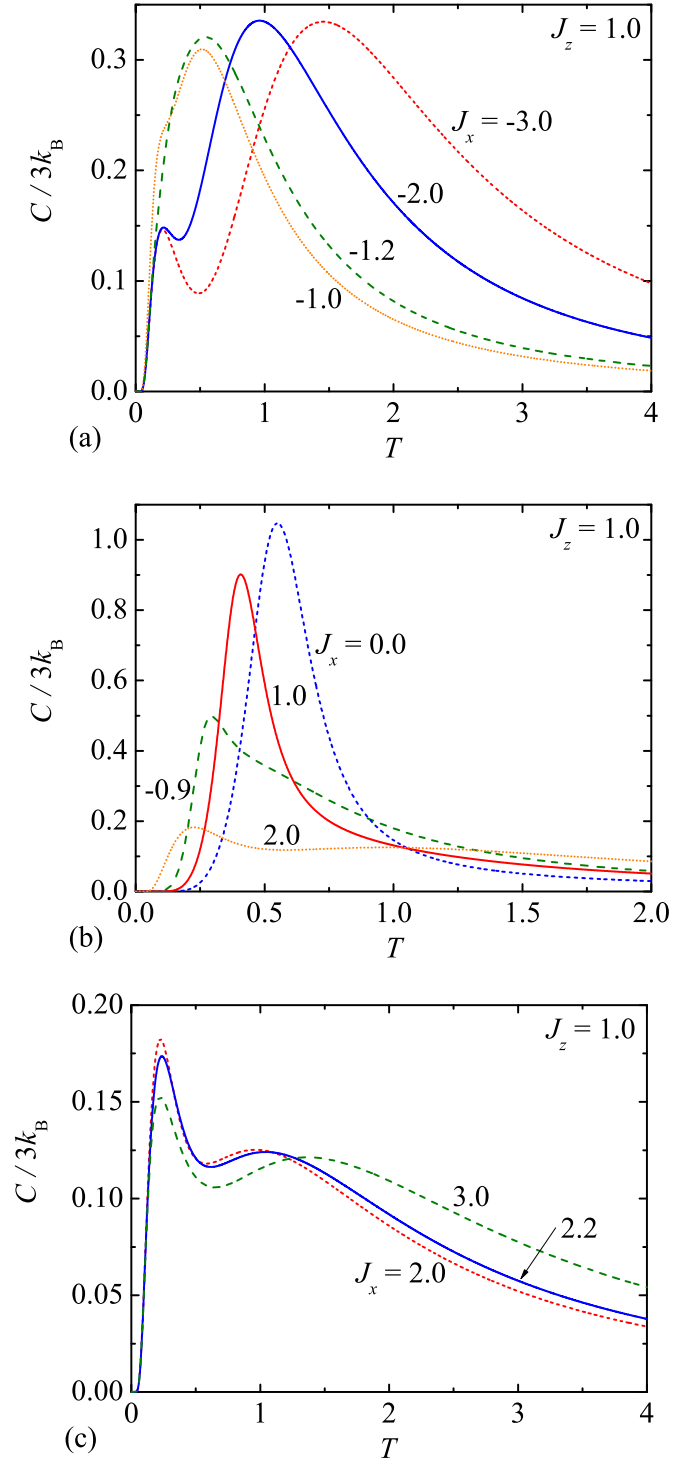


**Fig. 9.** (a) The Bell function versus temperature for three different Heisenberg intra-triangle interactions corresponding to three available ground states:  $J_z = J_x = 1.0$  (CAF phase),  $J_z = -J_x = 2.0$  (SQT phase),  $J_z = J_x = 2.0$  (DCA phase); (b) thermal variations of absolute values of the longitudinal and transverse pair correlation function between the spins from the same Heisenberg triangle for the parameter set  $J_z = J_x = 1.0$  (CAF phase).

entanglement above the unfrustrated parameter space for  $J_z \lesssim 2$  [see Fig. 8(a)], while the reentrance in the frustration temperatures makes possible to detect the unfrustrated region above the entangled parameter space [see Fig. 8(b)]. Both types of reentrances are apparently antagonistic and cannot emerge simultaneously.

### 3.6. Quantum non-locality

Next, it could be quite interesting to answer the question whether or not the spin-1/2 Ising–Heisenberg tube may violate the Bell inequality, because the entanglement and non-locality capture closely related but independent features of quantum correlations. A comprehensive analysis reveals that all three available ground state do not violate the Bell inequality, since the calculated value of the Bell function never exceeds the largest value  $B = 2$  allowed for classical correlations. To support this statement, we have depicted in Fig. 9(a) typical temperature variations of the Bell function for three different sets of the Heisenberg intra-triangle interaction, which drive the investigated model to the CAF, SQT and DCA ground states, respectively. Altogether, it could be concluded that quantum correlations are in the spin-1/2 Ising–Heisenberg tube strictly local in spite of the fact that the thermal entanglement is evidently present within the SQT ground state. The cusplike dip of the Bell function at the temperature  $T \approx 0.55$  of the particular case with the CAF ground states thus represents the



**Fig. 10.** Temperature variations of the specific heat (per one spin) for the fixed value of the longitudinal component of the Heisenberg coupling  $J_z = 1$  and several values of its transverse component  $J_x$ . The selected coupling constants  $J_x$  are consistent with the following ground states: (a) SQT phase; (b) CAF phase; (c) DCA phase.

most striking feature of the displayed dependences. A presence of this kind of singularity can be attributed to a crossing of absolute values of the transverse and longitudinal pair correlation function between the spins from the same Heisenberg triangle, which indicates according to Eq. (20) two different analytic prescriptions below and above a relevant crossing point [see Fig. 9(b)].

### 3.7. Specific heat and entropy

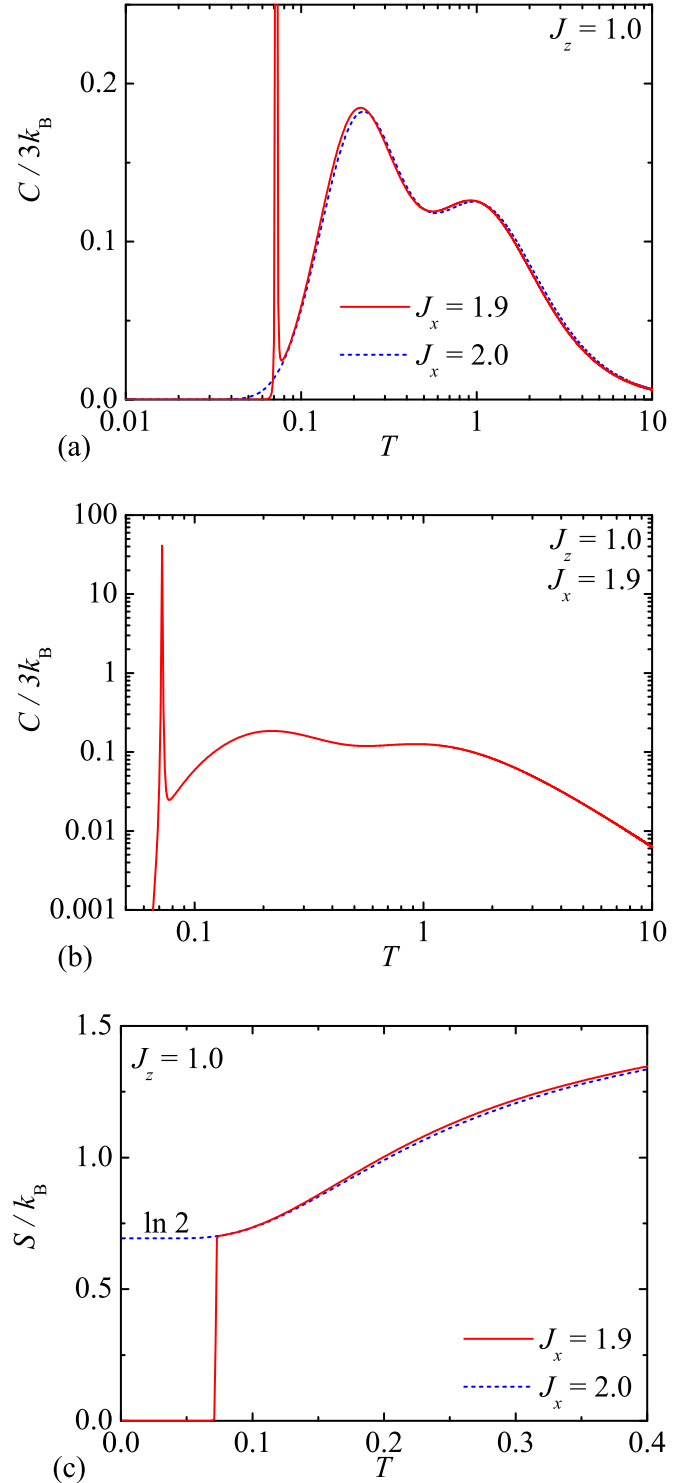
The substantial thermal variations of the correlation functions near the ground-state phase boundaries may manifest themselves also in unusual temperature dependences of basic thermodynamic quantities, so let us explore in the following typical thermal variations of the zero-field specific heat. It can be seen from Fig. 10 (a) that the specific heat can exhibit a peculiar double-peak temperature dependence when the SQT phase constitutes the ground state, whereas the low-temperature peak predominantly comes from thermally induced breakdown of the longitudinal correlation between the spins from the neighboring triangles. Note furthermore that the low-temperature peak gradually merges with the round high-temperature maximum, which shifts to lower temperatures when the spin system approaches the ground-state phase boundary between the SQT and CAF phases (at  $J_x = -1$  when  $J_z = 1$  is fixed).

Contrary to this, the specific heat shows a more common temperature dependence with a single maximum in a majority of the parameter space, which corresponds to the CAF ground state [Fig. 10(b)]. The only notable exception from this rule is when the Heisenberg intra-triangle coupling drives the spin system sufficiently close to the ground-state phase boundary with the DCA phase at  $J_x = 2.0$  assuming the fixed value of  $J_z = 1.0$  (see the subsequent paragraph). Last but not least, one recovers the more striking double-peak temperature dependence of the specific heat on assumption that the DCA phase constitutes the ground state [Fig. 10(c)]. Under this condition, the low-temperature peak predominantly comes from the thermally assisted breakdown of the longitudinal correlation between the spins from the neighboring triangles.

Let us turn back to the most spectacular temperature dependence of the specific heat, which involves three separate peaks as displayed in Fig. 11(a) and (b). The triple-peak thermal dependence of the zero-field specific heat can be found when the Heisenberg intra-triangle coupling drives the spin-1/2 Ising–Heisenberg tube towards the CAF ground state but still keeps it in a close vicinity of the phase boundary with the DCA phase (at  $J_x = 2.0$  for  $J_z = 1.0$ ). While thermal excitations of physically different origin are responsible for an existence of the high-temperature maximum at  $T \approx 1.0$ , the round maximum at moderate temperatures  $T \approx 0.25$  relates to a gradual decline of the longitudinal and transverse correlations between the spins from the same triangle. The most surprising is of course a presence of the sizable low-temperature peak, which could be at first sight easily confused with a temperature-driven first-order phase transition. The sharp and very narrow low-temperature peak, which emerges around the temperature  $T \approx 0.072$  by considering the particular case with  $J_x = 1.9$  and  $J_z = 1.0$ , can be ascribed to massive thermal excitations from the two-fold degenerate CAF ground state to the macroscopically degenerate DCA excited state. As a matter of fact, the locus of the sharp low-temperature peak is in a good concordance with the formula

$$T_p = \frac{4 - 2J_z - J_x}{\ln 4}, \quad (25)$$

which follows from a direct comparison of the Helmholtz free energies of the CAF and DCA phases provided that thermal variations of the internal energy and entropy are simply neglected. Thus, it could be concluded that the sharp low-temperature peak of the specific heat appears due to a high entropy gain, which originates from the chiral degrees of freedom of the DCA phase lying in energy just slightly above the doubly degenerate CAF ground state. To support this statement, we have plotted in Fig. 11 (c) the relevant thermal variations of the entropy, which provides



**Fig. 11.** (a) The semi-logarithmic plot for the temperature dependence of the specific heat (per one spin) exactly at the ground-state phase boundary CAF-DCA ( $J_x = 2.0$ ;  $J_z = 1.0$ ) and just below it ( $J_x = 1.9$ ;  $J_z = 1.0$ ); (b) the low-temperature peak of the specific heat for the case with  $J_z = 1.0$  and  $J_x = 1.9$  in a log-log scale; (c) the temperature dependence of the entropy (per one triangle) exactly at the ground-state phase boundary CAF-DCA ( $J_x = 2.0$ ;  $J_z = 1.0$ ) and just below it ( $J_x = 1.9$ ;  $J_z = 1.0$ ).

a convincing evidence for an abrupt but still continuous change of the entropy from almost zero to  $\ln 2$  associated with the vigorous thermal excitations from the CAF phase to the DCA phase. The abrupt entropy change can be detected at the temperature, which

is in accordance with the position of the sharp low-temperature peak of the specific heat given by the formula (25).

#### 4. Conclusion

In the present work, we have exactly solved the spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube by taking advantage of the local conservation of the total spin on each Heisenberg spin triangle and the classical transfer-matrix method. The elaborated rigorous procedure has enabled us to derive exact results for the ground-state phase diagram, basic thermodynamic quantities and several pair correlation functions, which were subsequently employed for a calculation of the concurrence and Bell function. The latter two quantities were used in order to quantify thermal entanglement and non-locality, which are related to quantum correlations between two spins coupled by the Heisenberg intra-triangle interaction. While none of three available ground states violates the Bell inequality, the SQT phase with a regular alternation of the symmetric quantum superposition of up-up-down and down-down-up on odd and even triangles (or vice versa) does exhibit the thermal entanglement.

It has been demonstrated that the SQT and DCA ground states are naturally frustrated unlike the unfrustrated CAF ground state, above which the so-called thermally activated spin frustration can develop provided that the antiferromagnetic intra-triangle interaction  $J_z > 0$  is considered. We have rigorously calculated the frustration temperature delimiting the unfrustrated region from the frustrated one, which was subsequently compared with the threshold temperature of a disappearance of the thermal entanglement. It has been verified that the frustration and threshold temperatures coincide at sufficiently low temperatures though they can be very different at higher temperatures. Moreover, it turns out that the spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube is thermally entangled just in the frustrated region, which implies that the frustration represents indispensable ground for a presence of the thermal entanglement in this spin system. Note furthermore that the lines of threshold and frustration temperatures may display a reentrant phenomenon though both reentrances are antagonistic and cannot appear simultaneously. Hence, the famous dictum that quantum correlations are gradually suppressed through thermal fluctuations is not of general validity, because thermal fluctuations can alternatively act against classical spin arrangements and thus leaving more space to an emergence of the thermal entanglement above a classical ground state.

The most interesting finding stemming from our study certainly represents an extraordinary diversity of temperature dependences of the zero-field specific heat, which may show up to three separate local maxima. The most remarkable temperature variations of the specific heat involve a sharp low-temperature peak extended in a very narrow temperature range, which is quite reminiscent of a temperature-driven first-order phase transition. However, it has been convincingly evidenced that this anomalous peak relates to massive thermal excitations from the doubly degenerate CAF phase to the macroscopically degenerate DCA phase

with two chiral degrees of freedom per each Heisenberg spin triangle. To the best of our knowledge, the spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube is just the second example of the exactly solved model with such an intriguing feature in addition to a hybrid spin-electron double-tetrahedral chain [39].

Finally, it should be also mentioned that the rigorous procedure elaborated in the present work can be straightforwardly adapted to account for the non-zero external magnetic field as well. Our future work will continue in this direction.

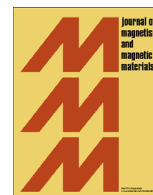
#### References

- [1] D.C. Mattis, *The Many-Body Problem: An Encyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension*, World Scientific, Singapore, 1993.
- [2] J.B. Parkinson, D.J.J. Farnell, *An Introduction to Quantum Spin Systems*, Springer, Berlin, 2010.
- [3] H.T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific, Singapore, 2004.
- [4] U. Schollwöck, J. Richter, D.J.J. Farnell, R.F. Bishop, *Quantum Magnetism*, Springer, Berlin, 2004.
- [5] C. Lacroix, Ph. Mendels, F. Mila, *Introduction to Frustrated Magnetism*, Springer, Berlin, 2011.
- [6] L.J. de Jongh, A.R. Miedema, *Adv. Phys.* 23 (1974) 1.
- [7] F.D.M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* 60 (1988) 635.
- [8] D.C. Cabra, A. Honecker, P. Pujol, *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997) 5126.
- [9] D.C. Cabra, A. Honecker, P. Pujol, *Phys. Rev. B* 58 (1998) 6241.
- [10] A. Honecker, F. Mila, M. Troyer, *Eur. Phys. J. B* 15 (2000) 227.
- [11] R. Citro, E. Orignac, N. Andrei, C. Itoi, S. Qin, *J. Phys.: Condens. Matter* 12 (2000) 3041.
- [12] G. Misguich, D. Serban, V. Pasquier, *Phys. Rev. B* 67 (2003) 214413.
- [13] S. Nishimoto, M. Arikawa, *Phys. Rev. B* 78 (2008) 054421.
- [14] T. Sakai, M. Sato, K. Okunishi, Y. Otsuka, K. Okamoto, C. Itoi, *Phys. Rev. B* 78 (2008) 184415.
- [15] Y. Fuji, S. Nishimoto, Y. Ohta, *J. Phys.: Conf. Ser.* 400 (2012) 032011.
- [16] Y. Zhao, S.-S. Gong, Y.-J. Wang, G. Su, *Phys. Rev. B* 86 (2012) 224406.
- [17] M. Arlego, W. Brenig, Y. Rahnavard, B. Willenberg, H.D. Rosales, G. Rossini, *Phys. Rev. B* 87 (2013) 014412.
- [18] F.A. Gómez Albarracín, M. Arlego, H.D. Rosales, *Phys. Rev. B* 90 (2014) 174403.
- [19] K. Yonaga, N. Shibata, *J. Phys. Soc. Jpn.* 84 (2015) 094706.
- [20] K. Kawano, M. Takahashi, *J. Phys. Soc. Jpn.* 66 (1997) 4001.
- [21] A. Luscher, R.M. Noack, G. Misguich, V.N. Kotov, F. Mila, *Phys. Rev. B* 70 (2004) 060405.
- [22] T. Sakai, M. Matsumoto, K. Okunishi, K. Okamoto, M. Sato, *Physica E* 29 (2005) 633.
- [23] J.B. Fouet, A. Läuchli, S. Pilgram, R.M. Noack, F. Mila, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 014409.
- [24] T.D. Schultz, D.C. Mattis, E.H. Lieb, *Rev. Mod. Phys.* 36 (1964) 856.
- [25] G. Seeber, P. Kögerler, B.M. Kariuki, L. Cronin, *Chem. Commun.* (2004) 1580.
- [26] J. Schnack, H. Nojiri, P. Kögerler, G.J.T. Cooper, L. Cronin, *Phys. Rev. B* 70 (2004) 174420.
- [27] N.B. Ivanov, J. Schnack, R. Schnalle, J. Richter, P. Kögerler, G.N. Newton, G.J. T. Cooper, L. Cronin, Y. Oshima, H. Nojiri, *Phys. Rev. Lett.* 105 (2010) 037206.
- [28] V.O. Garlea, A. Zheludev, L.-P. Regnault, J.-H. Chung, Y. Qiu, M. Boehm, K. Habicht, M. Meissner, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 037206.
- [29] O. Rojas, J. Strečka, M.L. Lyra, *Phys. Lett. A* 377 (2013) 920.
- [30] J. Strečka, O. Rojas, T. Verkholyak, M.L. Lyra, *Phys. Rev. E* 89 (2014) 022143.
- [31] R.J.V. dos Santos, M.L. Lyra, *Physica A* 182 (1992) 133.
- [32] W.K. Wothers, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 2245.
- [33] L. Amico, A. Osterloh, F. Plastina, R. Fazio, *Phys. Rev. A* 69 (2004) 022304.
- [34] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, *Phys. Lett. A* 200 (1995) 340.
- [35] Z.Y. Sun, Y.Y. Wu, H.L. Huang, B. Wang, *Solid State Commun.* 185 (2014) 30.
- [36] G. Auletta, M. Fortunato, G. Parisi, *Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, New York, 2009.
- [37] R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic, New York, 1982.
- [38] G. Toulouse, *Commun. Phys.* 2 (1977) 115.
- [39] L. Gálisová, J. Strečka, *Phys. Rev. E* 91 (2015) 022134.

Anexo **B**

Segundo Artigo Publicado





# Ground states, magnetization plateaus and bipartite entanglement of frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg and Heisenberg triangular tubes



Raphael C. Alécio<sup>a,\*</sup>, Marcelo L. Lyra<sup>a</sup>, Jozef Strečka<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-970 Maceió-AL, Brazil

<sup>b</sup> Department of Theoretical Physics and Astrophysics, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Park Angelinum 9, 040 01 Košice, Slovakia

## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 14 March 2016

Received in revised form

2 May 2016

Accepted 24 May 2016

Available online 25 May 2016

### Keywords:

Spin tube

Geometric frustration

Magnetization plateau

Quantum entanglement

## ABSTRACT

The ground-state phase diagram, magnetization process and bipartite entanglement of the frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg and Heisenberg triangular tube (three-leg ladder) are investigated in a non-zero external magnetic field. The exact ground-state phase diagram of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube with Heisenberg intra-rung and Ising inter-rung couplings consists of six distinct gapped phases, which manifest themselves in a magnetization curve as intermediate plateaus at zero, one-third and two-thirds of the saturation magnetization. Four out of six available ground states exhibit quantum entanglement between two spins from the same triangular unit evidenced by a non-zero concurrence. Density-matrix renormalization group calculations are used in order to construct the ground-state phase diagram of the analogous but purely quantum spin-1/2 Heisenberg tube with Heisenberg intra- and inter-rung couplings, which consists of four gapped and three gapless phases. The Heisenberg tube shows a continuous change of the magnetization instead of a plateau at zero magnetization, while the intermediate one-third and two-thirds plateaus may be present or not in the zero-temperature magnetization curve.

© 2016 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

Geometrically frustrated quantum spin models represent fascinating topics of current research interest emerging at the border of condensed matter physics [1] and quantum information [2,3]. Recent interest in quantum spin models from the perspective of quantum information and computation has been stimulated mainly by the fact that these models provide indispensable ground for the development and further testing of entanglement measures within realistic models of real many-body solid-state systems [2,3]. A quantum spin model is said to be geometrically frustrated when the spins cannot simultaneously satisfy all underlying pair interactions [4]. For example, any lattice built up from elementary triangular plaquettes will be subject to a geometric spin frustration provided that antiferromagnetic interactions are assumed [1,5].

One-dimensional (1D) quantum spin systems deserve a special mention among the wide class of geometrically frustrated models, because they are basically affected by the mutual interplay between the geometric spin frustration and extraordinarily strong quantum fluctuations. Geometrically frustrated 1D quantum spin models display exotic quantum ground states such as the gapped

dimerized [6,7] and Haldane-like phases [8,9] with a peculiar topological order, or the gapless one- or two-component Tomonaga-Luttinger spin-liquid phases [10]. Another intriguing feature of geometrically frustrated 1D quantum spin systems lies in the presence of spin gap [11] and quantized plateaus in the magnetization process [12–14]. The existence of fractional plateaus in the zero-temperature magnetization curve of 1D quantum spin systems is restricted by the quantization condition  $p(S_u - m_u) \in Z$  ( $p$  is the period of the ground state,  $S_u$  and  $m_u$  are the total spin and total magnetization of the unit cell), which is known as the Oshikawa-Yamanaka-Affleck rule [15,16]. According to this rule, the number of available plateaus can be lifted either by increasing the total spin of the unit cell  $S_u$  or by breaking the translational symmetry (i.e. by increasing  $p$ ).

Bearing this in mind, the spin-1/2 triangular tube with antiferromagnetic interactions represents a valuable example of a 1D frustrated spin model, which has large enough total spin per unit cell ( $S_u = 3/2$ ) and is simultaneously accessible to a spontaneous symmetry breaking. The magnetization plateaus at zero, one-third and two-thirds of the saturation moment can accordingly occur in the zero-temperature magnetization curve of the spin-1/2 triangular tube once the period of the ground state is doubled ( $p=2$ ). Whether or not those magnetization plateaus indeed emerge may basically depend on the competition between the intra-triangle and inter-triangle coupling constants [17]. For instance, the

\* Corresponding author.

experimental realization of the frustrated spin-1/2 Heisenberg triangular tube [(CuCl<sub>2</sub>tachH)<sub>3</sub>Cl]Cl<sub>2</sub> (tach=1,3,5-triaminocyclohexane) does not show any magnetization plateau, since the inter-triangle coupling constant is much stronger than the intra-triangle interaction [18,19].

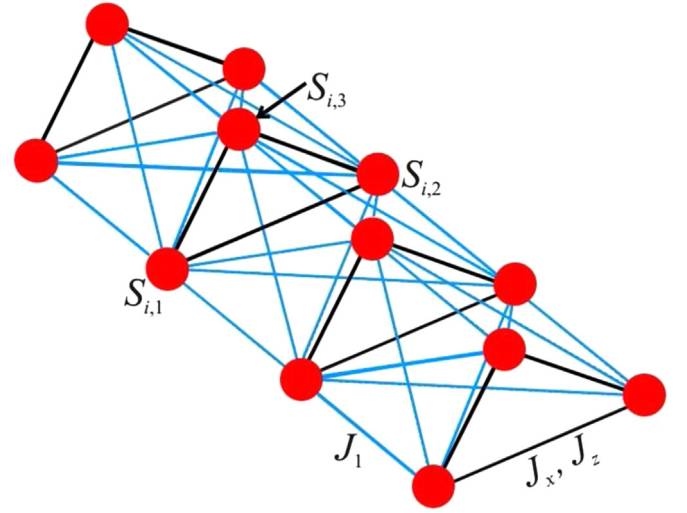
Another interesting aspect of the spin-1/2 Heisenberg triangular tube concerns with the spin chirality. It has been demonstrated that the geometric spin frustration may cause a spin chirality order in the presence of a small magnetic field or a small exchange anisotropy [20–22]. Quite recently, we have proposed and exactly solved a simplified version of the spin-1/2 Ising-Heisenberg triangular tube with the Heisenberg intra-rung and the Ising inter-rung coupling in the absence of an external magnetic field [23]. In spite of a certain over-simplification, the frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg tube also shows one peculiar ground state with a high macroscopic degeneracy due to the chiral degrees of freedom of elementary triangular plaquettes. In addition, one generally detects an anomalous behavior of basic thermodynamic quantities (entropy, specific heat) when the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube is driven sufficiently close to a phase boundary with the macroscopically degenerate ground state, which is quite reminiscent of a thermally-induced first-order phase transition [23].

In the present work, we will focus our attention to the ground-state properties of two frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg and Heisenberg triangular tubes. The former spin-1/2 Ising-Heisenberg tube with the Ising inter-rung coupling is fully exactly tractable, because it can be effectively mapped to a classical composite spin-chain model by making use of the total spin of the elementary triangular unit. By contrast, the latter spin-1/2 Heisenberg tube with the Heisenberg inter-rung coupling can be mapped following the same procedure to a quantum composite spin-chain model, which can be subsequently treated by density-matrix renormalization group (DMRG) calculations. For both considered models we will report the ground-state phase diagrams, magnetization curves and the pair correlation functions, which will be subsequently used to quantify the bipartite quantum entanglement within the relevant ground states.

The organization of this paper is as follows. The frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg tube is introduced in Section 2 along with its exact analytical treatment. Section 3 briefly describes the details of DMRG calculations for the analogous but purely quantum spin-1/2 Heisenberg tube. The most interesting results for the ground state, magnetization process, pair correlation functions and bipartite entanglement are presented in Section 4. Finally, a few concluding remarks are drawn in Section 5.

## 2. Ising-Heisenberg tube

Let us consider the frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg triangular tube (three-leg ladder) schematically illustrated in Fig. 1, which takes into account the Heisenberg intra-rung interaction, the Ising inter-rung interaction and the effect of external magnetic field. The XXZ Heisenberg intra-rung coupling is assigned to all spin pairs belonging to the same triangular rung, while the Ising inter-rung interaction is supposed between all spin pairs from nearest-neighbor triangular rungs. It is worth noticing that the triangular tube can be alternatively viewed as the frustrated three-leg ladder with periodic boundary condition along the rung direction, from which the terminology of both considered coupling constants follows. The spin-1/2 Ising-Heisenberg tube is defined by the following Hamiltonian



**Fig. 1.** A diagrammatic representation of the frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg triangular tube. Thick (black) lines represent the XXZ Heisenberg intra-rung coupling ( $J_x, J_z$ ), while thin (blue) lines correspond to the Ising inter-rung coupling ( $J_1$ ). (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 \left[ J_x \left( \hat{S}_{ij}^x \hat{S}_{i,j+1}^x + \hat{S}_{ij}^y \hat{S}_{i,j+1}^y \right) + J_z \hat{S}_{ij}^z \hat{S}_{i,j+1}^z \right] + J_1 \sum_{i=1}^N \left( \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{ij}^z \right) \left( \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{i+1,j}^z \right) - h \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{ij}^z, \quad (1)$$

where  $\hat{S}_{ij}^\alpha$  stands for the standard spin-1/2 operator, the superscript  $\alpha \in x, y, z$  denotes its respective spatial component, the subscript  $j = 1, 2, 3$  labels the lattice position within the  $i$ -th triangular rung and periodic boundary conditions  $S_{i,4} \equiv S_{i,1}$ ,  $S_{N+1,j} \equiv S_{1,j}$  are imposed (see Fig. 1). The interaction terms  $J_x$  and  $J_z$  specify the spatially anisotropic XXZ Heisenberg intra-rung interaction between the spin pairs from the same triangular rung, the coupling constant  $J_1$  labels the Ising inter-rung interaction between the spin pairs from the nearest-neighbor triangular rungs and the field term  $h$  takes into account the Zeeman's energy. The spin-1/2 Ising-Heisenberg triangular tube defined by the Hamiltonian (1) is a natural extension of the model introduced in our preceding work [23], which additionally takes into account the effect of external magnetic field.

The Hamiltonian (1) of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube can be alternatively rewritten in terms of the total spin of the Heisenberg spin triangles  $\hat{T}_i = \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{ij}$  and its z-component  $\hat{T}_i^z = \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{ij}^z$ . Using the spin identity  $(\hat{T}_i^\alpha)^2 = \frac{3}{4} - 2(\hat{S}_{i,1}^\alpha \hat{S}_{i,2}^\alpha + \hat{S}_{i,2}^\alpha \hat{S}_{i,3}^\alpha + \hat{S}_{i,3}^\alpha \hat{S}_{i,1}^\alpha)$ , the total Hamiltonian (1) can be recast into the form

$$\hat{H} = -\frac{3N}{8}(2J_x + J_z) + \sum_{i=1}^N \hat{H}_i, \quad (2)$$

where the first term is a less important constant and the second term is the sum of symmetrically defined Hamiltonians  $\hat{H}_i$  each involving two consecutive composite spin operators  $\hat{T}_i, \hat{T}_{i+1}$  and their z-components

$$\hat{H}_i = J_1 \hat{T}_i^z \hat{T}_{i+1}^z + \frac{J_x}{4} \left( \frac{\hat{T}_i^2}{T_i} + \frac{\hat{T}_{i+1}^2}{T_{i+1}} \right) + \frac{J_z - J_x}{4} \left[ \left( \frac{\hat{T}_i^z}{T_i} \right)^2 + \left( \frac{\hat{T}_{i+1}^z}{T_{i+1}} \right)^2 \right] - \frac{h}{2} \left( \hat{T}_i^z + \hat{T}_{i+1}^z \right). \quad (3)$$

Apparently, the total spin of the  $i$ -th Heisenberg spin triangle (rung) and its  $z$ -component are conserved quantities with well defined quantum numbers, because the corresponding spin operators commute with the total Hamiltonian (1). The eigenvalues of the Hamiltonian (3) can be accordingly expressed through the eigenvalues of the composite spin operators  $\hat{T}_i^2$  and  $\hat{T}_i^z$ . The basic quantum-mechanical law for the composition of spin angular momenta implies that the eigenvalues of the composite spin operators  $\hat{T}_i^2$  and  $\hat{T}_i^z$  are quantized according to the rules  $T_i(T_i + 1)$  with  $T_i = \{1/2, 3/2\}$  and  $T_i^z = \{-T_i, -T_i + 1, \dots, T_i\}$ , respectively. In this regard, the Hamiltonian (3) has been put into a fully diagonal form and its respective eigenvalues are given by

$$E_i = J_1 T_i^z T_{i+1}^z + \frac{J_x}{4} [T_i(T_i + 1) + T_{i+1}(T_{i+1} + 1)] + \frac{J_z - J_x}{4} [(T_i^z)^2 + (T_{i+1}^z)^2] - \frac{h}{2} (T_i^z + T_{i+1}^z). \tag{4}$$

By introducing the total spin for the Heisenberg spin triangles (rungs) one consequently obtains an exact mapping equivalence between the Hamiltonians of the spin-1/2 Ising-Heisenberg triangular tube and the classical composite spin-chain model, in which the Ising interaction  $J_1$  determines the nearest-neighbor coupling between  $z$ -components of the composite spins, the XXZ Heisenberg interaction ( $J_x, J_z$ ) shifts the energy corresponding to two possible values of the composite spins  $T_i = 1/2, 3/2$ , and respectively, the external magnetic field  $h$  acts on  $z$ -component of the composite spins  $T_i^z$ . The complete set of eigenstates of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube can be obtained from Eqs. (2) and (4) after taking into consideration all available combinations of the quantum spin numbers  $T_i$  and  $T_i^z$  for each  $i$ , from which all possible ground states can be easily constructed by extending the lowest-energy eigenstate (4) to the whole triangular spin tube (see the Section 4).

It is quite clear that the expectation values for the nearest-neighbor pair correlation functions  $C_{\alpha\alpha} = \langle \hat{S}_{ij}^\alpha \hat{S}_{i+1}^\alpha \rangle$  and the averaged magnetization  $m = \langle \hat{S}_{ij}^z \rangle$  can be readily calculated once all available ground states of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube are found. These quantities gain an insight into the local spin arrangement inherent to the relevant ground states, but they can be alternatively explored for the computation of the degree of quantum entanglement within unusual quantum ground states. One of the most common measures of bipartite quantum entanglement is the so-called entanglement of formation ( $E_f$ ) defined as [24]

$$E_f(\rho) = \min \left\{ \sum_i p_i S(\rho_{A_i}) \right\}, \tag{5}$$

where the minimum is taken over all realizations of  $\rho_{AB} = \sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$ , and  $S(\rho_{A_i})$  is the von Neumann entropy of the reduced density matrix  $\rho_{A_i} = \text{Tr}_B |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ . The expression for entanglement of formation  $E_f$  reduces in the special case of the quantum entanglement between two qubits to the following form

$$E_f(\rho) = - \sum_{a=\pm 1} \frac{\sqrt{1+aC}}{2} \ln \left( \frac{\sqrt{1+aC}}{2} \right), \tag{6}$$

which monotonically depends on the concurrence [24]

$$C = \max \{ 0; 2\lambda_{\max} - \text{Tr}[R] \}. \tag{7}$$

Here,  $\lambda_{\max}$  is the largest eigenvalue of the positive Hermitian matrix  $R = \sqrt{\rho} (\sigma^y \otimes \sigma^y) \rho^* (\sigma^y \otimes \sigma^y) \sqrt{\rho}$ ,  $\rho^*$  is the complex conjugate of the reduced density matrix  $\rho$  and  $\sigma^y$  is the relevant Pauli matrix. Because the entanglement of formation (6) is a monotonous function of the concurrence (7), the latter quantity can be also

used as a quantum entanglement estimator. The non-zero elements of the density matrix  $\rho$  for two spin-1/2 particles coupled through the XXZ Heisenberg interaction are given by [25]

$$\begin{aligned} \rho_{11} &= \frac{1}{4} + m + C_{zz}, \\ \rho_{22} &= \rho_{33} = \frac{1}{4} - C_{zz}, \\ \rho_{44} &= \frac{1}{4} - m + C_{zz}, \\ \rho_{23} &= \rho_{32} = 2C_{xx}, \end{aligned} \tag{8}$$

whereas all other matrix elements are null. The concurrence between two spin-1/2 particles interacting via the XXZ Heisenberg coupling then follows from the formula [25]

$$C = \max \left\{ 0; 4|C_{xx}| - 2\sqrt{\left(\frac{1}{4} + C_{zz}\right)^2 - m^2} \right\}. \tag{9}$$

As one can see, the two-qubit concurrence can be calculated from the expectation values of two spatial components of the pair correlation function and the magnetization, whereas it vanishes whenever there are no quantum correlations between two spins and becomes unity for maximally entangled spins [26].

### 3. Heisenberg tube

It might be quite interesting to contrast the exact results reported for the spin-1/2 Ising-Heisenberg triangular tube with the results for the analogous but fully quantum spin-1/2 Heisenberg triangular tube, which is defined through the Hamiltonian

$$\begin{aligned} \hat{H} &= J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{i,j} \cdot \hat{S}_{i+1,j} \\ &+ J_1 \sum_{i=1}^N \left( \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{i,j} \right) \cdot \left( \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{i+1,j} \right) \\ &- h \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{i,j}^z. \end{aligned} \tag{10}$$

The interaction terms  $J$  and  $J_1$  have similar meaning as described previously for the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube with the exception that they both refer to the isotropic Heisenberg couplings. The spin-1/2 Heisenberg triangular tube belongs to a class of frustrated ladders comprehensively studied in Ref. [17], so let us recall just a few crucial steps of its rigorous treatment. At first, the total Hamiltonian (10) of the spin-1/2 Heisenberg tube will be rewritten using the total spin of the  $i$ -th rung  $\hat{T}_i = \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{i,j}$  and its  $z$ -component  $\hat{T}_i^z = \sum_{j=1}^3 \hat{S}_{i,j}^z$

$$\hat{H} = - \frac{3N}{4} J + \sum_{i=1}^N \left[ J_1 \hat{T}_i \cdot \hat{T}_{i+1} + \frac{J}{4} \left( \hat{T}_i^2 + \hat{T}_{i+1}^2 \right) - \frac{h}{2} \left( \hat{T}_i^z + \hat{T}_{i+1}^z \right) \right]. \tag{11}$$

It is quite evident that one obtains a similar composite spin-chain model as obtained previously for the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube [cf. Eq. (11) with Eqs. (2) and (3) considering the particular case  $J_x = J_z = J$ ], but the nearest-neighbor coupling  $J_1$  between the composite spins is presently the isotropic Heisenberg coupling rather than the simpler Ising coupling. Hence, it follows that the composite spin-chain model defined through the Hamiltonian (11) is still not in a fully diagonal form and preserves a quantum character. However, the total spin of the  $i$ -th rung and its  $z$ -component remain conserved quantities with well defined quantum numbers, which allows one to get rid of a geometric spin

frustration and to employ the state-of-the-art numerical calculations based on DMRG or QMC methods in order to obtain precise numerical results. In addition, it turns out that the total spin of rung is either the same or regularly alternates within all available ground states [17], which means that the ground states of the spin-1/2 Heisenberg tube can be obtained from the numerical simulation of only three composite spin-chain models:

- the effective spin-3/2 Heisenberg chain with the overall energy

$$E_{3/2} = \frac{3}{4}NJ + J_1 E^{3/2}(N, S_f^z), \quad (12)$$

- the effective mixed spin-(1/2,3/2) Heisenberg chain with the energy

$$E_{1/2-3/2} = J_1 E^{1/2-3/2}(N, S_f^z), \quad (13)$$

- the effective spin-1/2 Heisenberg chain with the corresponding energy

$$E_{1/2} = -\frac{3}{4}NJ + J_1 E^{1/2}(N, S_f^z). \quad (14)$$

In above,  $E^*(N, S_f^z)$  denotes the energy of the effective Heisenberg chain of  $N$  composite spins given by the Hamiltonian  $\hat{H}_{eff} = \sum_{i=1}^N \hat{T}_i \cdot \hat{T}_{i+1}$  within the sector with the total spin  $S_f^z = \sum_{i=1}^N T_i^z$  (the coupling constant is set to unity within the effective model). It is worthwhile to remark that each spin state  $T_i = 1/2$  comes with two different chiralities. The eigenvalues of the Hamiltonian (10) are independent of these two chiralities, but this degeneracy gives rise to an entropy  $k_B \ln 2$  per each rung with the total spin  $T_i = 1/2$ .

The ground-state phase diagram and magnetization process of the spin-1/2 Heisenberg triangular tube has been previously investigated using DMRG simulations [27] for the effective chains of 60 composite spins [17]. In the present work, we have adapted the open source software from Algorithms and Libraries for Physics Simulations (ALPS) project [28] in order to perform DMRG simulations for the larger effective chains of 120 composite spins, which correspond to the spin-1/2 Heisenberg triangular tube of 360 spins. The DMRG simulations have been performed with 16 sweeps at the target system size, whereas the number of kept states was raised up to 1000 during the final sweeps. The large number of sweeps was necessary because of the choice of periodic boundary conditions. We have found the following lowest energies for three composite spin-chain models:  $E^{1/2}(120, 0) = -0.44320$ ,  $E^{1/2-3/2}(120, 0) = -0.98361$  and  $E^{3/2}(120, 0) = -2.82832$ , which agree well with the numerical data reported previously. Consequently, it was possible to estimate the ground-state energy of an infinite chain with an accuracy of  $10^{-4}$  using Eqs. (10)–(14) without any extrapolation (except for special values of the field where the magnetization jumps).

## 4. Results and discussion

In this section, let us proceed to a discussion of the most interesting results for the frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg and Heisenberg triangular tubes in an applied external magnetic field by assuming the particular case with the antiferromagnetic interactions. For simplicity, our attention will be henceforth paid to the special case of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube with the isotropic Heisenberg intra-rung interaction  $J_x = J_z = J$ , the magnetic properties of which will be later confronted with the precise numerical results for the analogous but purely quantum spin-1/2 Heisenberg tube.

### 4.1. Ground-state phase diagrams

All possible ground states of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube can be straightforwardly obtained from the diagonalized form of the Hamiltonian (4) after taking into consideration all available combinations of quantum spin numbers involved therein. By inspection, one finds six different ground states: the classical antiferromagnetic phase (CAF)

$$|CAF\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j-1} \otimes |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle_{2j-1} \otimes |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j} \end{cases}, \quad (15)$$

the classical ferromagnetic phase (CFO)

$$|CFO\rangle = \prod_{i=1}^N |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_i, \quad (16)$$

the quantum antiferromagnetic phase (QAF)

$$|QAF\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j-1} \otimes \left| -\frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} \left| -\frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j-1} \otimes \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j} \end{cases}, \quad (17)$$

the quantum ferromagnetic phase (QFO)

$$|QFO\rangle = \prod_{j=1}^N \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_j, \quad (18)$$

the mixed classical-quantum ferrimagnetic phase (MFI)

$$|MFI\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j-1} \otimes \left| -\frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} \left| -\frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j-1} \otimes |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j} \end{cases}, \quad (19)$$

and the mixed classical-quantum ferromagnetic phase (MFO)

$$|MFO\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j-1} \otimes \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j-1} \otimes |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j} \end{cases}. \quad (20)$$

In above, we have used the following notation for the eigenvectors of the  $j$ -th Heisenberg spin triangle  $|\pm 1/2, R\rangle_j$  and  $|\pm 1/2, L\rangle_j$  with the total spin  $T_j^z = \pm 1/2$  and two opposite (right- and left-hand) chiralities

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, R \right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \right)_j \\ \left| \frac{1}{2}, L \right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \right)_j \\ \left| -\frac{1}{2}, R \right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right)_j \\ \left| -\frac{1}{2}, L \right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right)_j. \end{aligned} \quad (21)$$

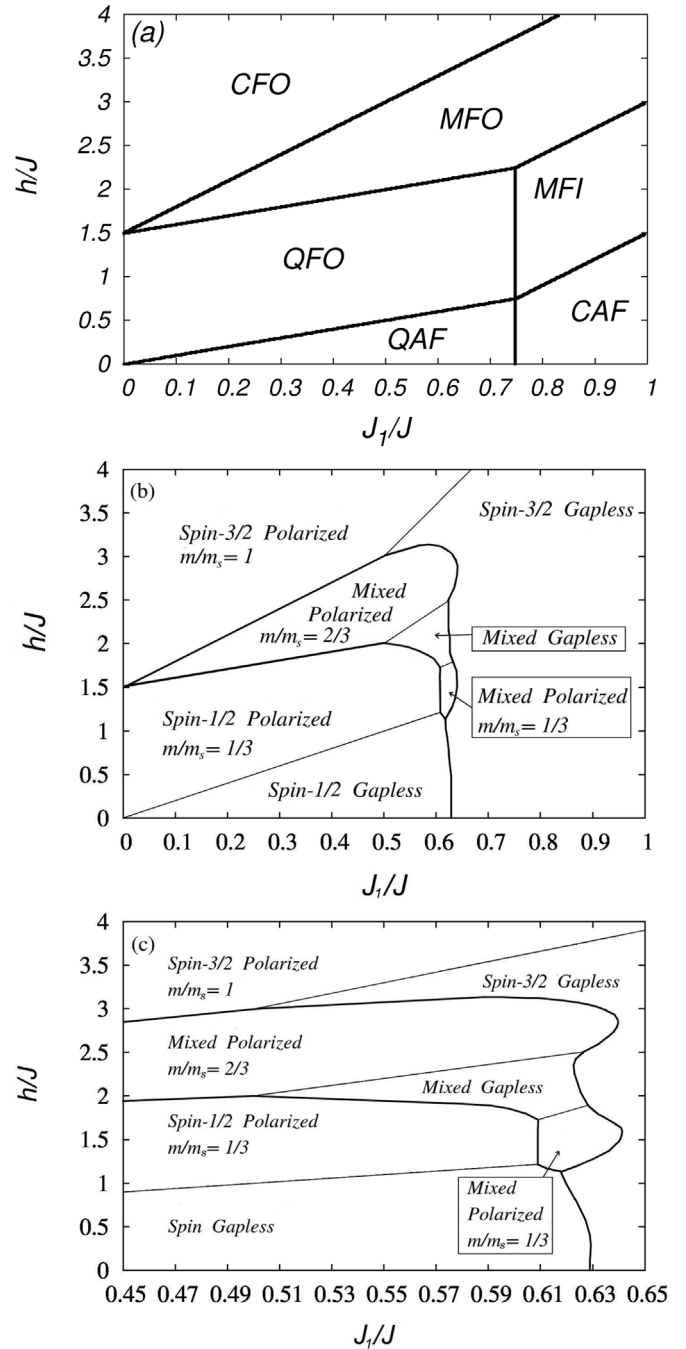
The corresponding eigenenergies per elementary triangular unit (Heisenberg spin triangle) are given by

$$\begin{aligned}
 E_{\text{CAF}} &= -\frac{9J_1}{4} + \frac{3J}{4}, \\
 E_{\text{CFO}} &= \frac{9J_1}{4} + \frac{3J}{4} - \frac{3h}{2}, \\
 E_{\text{QAF}} &= -\frac{J_1}{4} - \frac{3J}{4}, \\
 E_{\text{QFO}} &= \frac{J_1}{4} - \frac{3J}{4} - \frac{h}{2}, \\
 E_{\text{MFI}} &= -\frac{3J_1}{4} - \frac{h}{2}, \\
 E_{\text{MFO}} &= \frac{3J_1}{4} - h.
 \end{aligned} \tag{22}$$

It is quite obvious from the eigenvectors (15)–(20) that the four ground states CAF, QAF, MFI and MFO have a translationally-broken symmetry due to the antiferromagnetic coupling between spins from neighboring triangular units in contrast to the other two ground states CFO and QFO, which are translationally invariant. In addition, the chiral degrees of freedom of the Heisenberg spin triangles within the eigenstates (21) with the total spin  $T_j = 1/2$  are responsible for a macroscopic degeneracy of the ground states QAF, QFO, MFI and MFO. The ground state QAF has the largest residual entropy  $S = (N + 1)k_B \ln 2$  due to a mutual interplay of translationally broken symmetry and chiral degrees of freedom, the ground state QFO has the residual entropy  $S = Nk_B \ln 2$  originating solely from the chiral degrees of freedom, while the latter two ground states MFI and MFO have the residual entropy  $S = (N/2 + 1)k_B \ln 2$  coming from the translationally broken symmetry and chiral degrees of freedom.

The ground-state phase diagram of the spin-1/2 Ising-Heisenberg triangular tube is depicted in Fig. 2(a). At zero magnetic field  $h=0$  the antiferromagnetic phases QAF and CAF with a zero net magnetization emerge as the only two possible ground states. The ground state QAF of a quantum character is stable in a parameter region with the predominant Heisenberg intra-rung interaction  $J_1/J < 3/4$ , while the ground state CAF of a classical nature is stable in a parameter region with the predominant Ising inter-rung interaction  $J_1/J > 3/4$ . Of course, the antiferromagnetic order inherent to the ground states QAF or CAF breaks down when the external magnetic field approaches its first critical value  $h_{c1}$ , above which another two unusual quantum ground states QFO and MFI appear. It is evident from Fig. 2(a) that the ground state QAF turns to the QFO phase at the critical field  $h_{c1} = J_1$ , while the ground state CAF evolves into the MFI phase at the critical field  $h_{c1} = 3J_1 - 3J/2$ . The ground states QFO and MFI are stable at moderate values of the magnetic field ranging up to the second critical fields  $h_{c2} = J_1 + 3J/2$  and  $3J_1$ , respectively, which represent a lower boundary for a presence of the ground state MFO with a modulated ferromagnetic character. Finally, all spins are forced to align within the fully polarized ground state CF for the stronger magnetic fields than the saturation field  $h_{c3} = 3J_1 + 3J/2$ .

To compare with, the ground-state phase diagram of the fully quantum spin-1/2 Heisenberg triangular tube is shown in Fig. 2(b). Both ground-state phase diagrams generally display several common features especially for small enough values of the interaction ratio  $J_1/J < 1/2$ , while they show quite distinct features mainly for larger values of the interaction ratio  $J_1/J > 1/2$ . At low enough magnetic fields, the ground state of the spin-1/2 Heisenberg tube can be effectively described either by the spin-liquid state of the spin-1/2 Heisenberg chain (for  $J_1/J < 0.629$ ), or by the spin-liquid state of the spin-3/2 Heisenberg chain (for  $J_1/J > 0.629$ ). In any case, both phases are gapless and can be characterized by a continuous change of the magnetization upon rising the magnetic field. This finding represents quite distinct feature of the spin-1/2 Heisenberg tube, which cannot be in principle found in the analogous spin-1/2 Ising-Heisenberg tube regardless of a relative strength of both considered coupling constants.



**Fig. 2.** (a) Ground-state phase diagram of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube in  $J_1/J - h/J$  plane, which consists of six distinct gapped phases. (b) Ground-state phase diagram of the spin-1/2 Heisenberg tube in  $J_1/J - h/J$  plane, which constitute four gapped and three gapless phases. (c) A detail from the ground-state phase diagram of the spin-1/2 Heisenberg tube, which shows a reentrant character of the phase boundary related to the effective spin-3/2 gapless phase. Thick (thin) lines denote first-order (second-order) phase transitions.

However, the energy gap of the effective spin-1/2 Heisenberg chain closes at the critical field  $h_{c1} = 2J_1$ , whereas the fully polarized state of this effective model is the lowest-energy state of the spin-1/2 Heisenberg tube unless the second critical field  $h_{c2} = J_1 + 3J/2$  is reached. It is quite apparent that the fully polarized state of the effective spin-1/2 Heisenberg chain, as the ground state of the spin-1/2 Heisenberg tube, exactly coincides with the ground state QFO of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube given by the eigenvector (18). Similarly, the fully polarized state of the effective mixed spin-(1/2,3/2) Heisenberg chain, which appears as

another ground state of the spin-1/2 Heisenberg tube in between the second and third critical fields  $h_{c2} = J_1 + 3J/2$  and  $h_{c3} = 3J_1 + 3J/2$ , can be exactly identified with the ground state MFO of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube given by the eigenvector (20). As a matter of fact, this eigenstate is delimited precisely by the same critical fields as reported for the ground state MFO of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube. It can be thus concluded that there is a perfect coincidence between the ground-state phase diagrams of the spin-1/2 Ising-Heisenberg and Heisenberg tube in a parameter space  $J_1/J < 1/2$  and  $h > 2J_1$ , i.e. once the interaction ratio  $J_1/J$  is sufficiently small and the energy gap of the effective spin-1/2 Heisenberg chain is closed by the magnetic field.

Contrary to this, the ground-state phase diagrams of the spin-1/2 Ising-Heisenberg and Heisenberg tube differ basically at moderate and sufficiently strong values of the interaction ratio  $J_1/J > 1/2$  [c.f. Fig. 2(a) with Fig. 2(c)]. In addition to three gapless ground states of the spin-1/2 Heisenberg tube, which correspond to the effective spin-1/2, mixed spin-(1/2,3/2) and spin-3/2 Heisenberg chains, one novel gapful phase inherent to the intermediate one-half plateau of the effective mixed spin-(1/2,3/2) Heisenberg chain can be found at moderate values of  $h/J$  and  $J_1/J$ . The intermediate one-half plateau of the effective mixed spin-(1/2,3/2) Heisenberg chain gives rise to the novel one-third plateau of the spin-1/2 Heisenberg tube, which is of completely different origin than the one-third plateau originating from the fully polarized state of the effective spin-1/2 Heisenberg chain. It should be pointed out, moreover, that the ground state MFI of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube cannot capture spin arrangements of none of these novel quantum ground states of the spin-1/2 Heisenberg tube.

#### 4.2. Magnetization process

Next, let us examine zero-temperature magnetization curves of the spin-1/2 Ising-Heisenberg and Heisenberg triangular tubes. According to the Oshikawa-Yamanaka-Affleck rule, the spin-1/2 triangular tube may possibly exhibit intermediate magnetization plateaus at zero, one-third and two-thirds of the saturation magnetization when the doubling of unit cell is taken into consideration. It can be seen from Fig. 3(a) that the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube exhibits all available magnetization plateaus. More specifically, the antiferromagnetic ground states QAF and CAF are responsible for a trivial plateau with zero net magnetization, the ground states QFO and MFI are pertinent to the intermediate one-third magnetization plateau and finally, the ground state MFO is respective realization of the two-thirds magnetization plateau. Hence, it follows that the zero, one-third and two-thirds magnetization plateaus are always present in the zero-temperature magnetization curve of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube even though the underlying mechanism for the plateau formation depends basically on whether the interaction ratio is greater or smaller than the specific value  $J_1/J = 3/4$ . In the former case  $J_1/J < 3/4$  the zero and one-third magnetization plateaus correspond to the ground states QAF and QFO, while the zero and one-third magnetization plateaus appear as a result of the ground states CAF and MFI in the latter case with  $J_1/J > 3/4$ .

The zero-temperature magnetization process of the spin-1/2 Heisenberg triangular tube can be obtained from DMRG data for the lowest-energy states of the three effective spin-chain models (12)–(14) calculated separately for each sector with the total spin  $S_T^z$ . The magnetic field, at which the magnetization undergoes the respective change of the total spin from  $S_T^z$  to  $S_T^z + 1$ , can be calculated from the difference between the lowest-energy levels from adjacent sectors  $h = E_g^{h=0}(N, S_T^z + 1) - E_g^{h=0}(N, S_T^z)$  at zero magnetic field. Fig. 3(b) illustrates a 3D plot of the magnetization against the relative strength of the interaction ratio  $J_1/J$  and the magnetic field

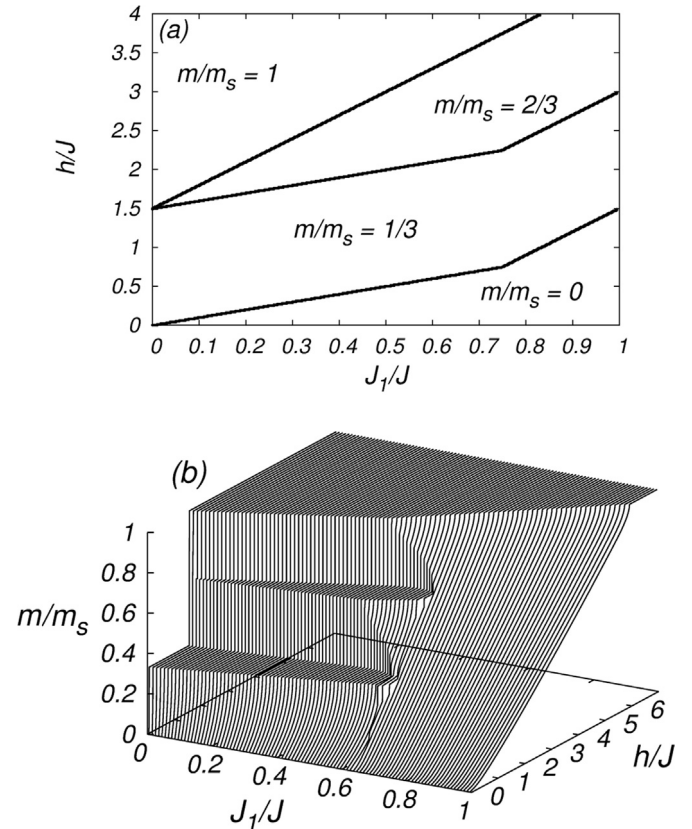
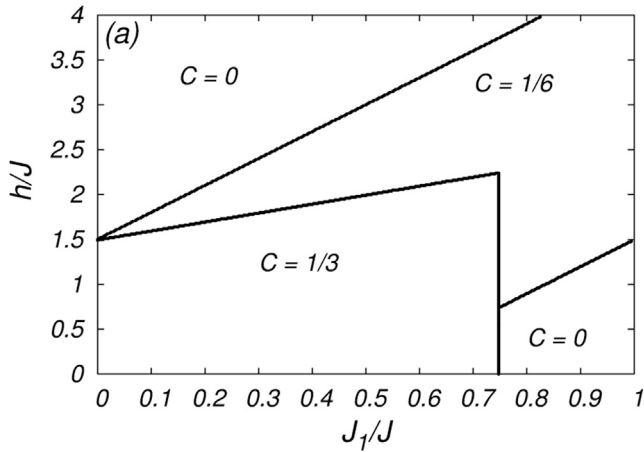


Fig. 3. The magnetization normalized with respect to the saturation value as a function the interaction ratio  $J_1/J$  and the magnetic field  $h/J$  for: (a) the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube; (b) the spin-1/2 Heisenberg tube.

$h/J$ . As one can see, the magnetization continuously varies from zero up to the saturation value upon strengthening of the magnetic field on assumption that the interaction ratio  $J_1/J$  is sufficiently large. Under this condition, the spin-1/2 Heisenberg tube does not display any intermediate magnetization plateau. Contrary to this, the magnetization shows a smooth change with the rising magnetic field only until the one-third magnetization plateau is reached when the interaction ratio is sufficiently small  $J_1/J < 1/2$ . The one-third plateau is subsequently followed by an abrupt magnetization jump towards a narrower two-thirds plateau, which ends up at the saturation field where the magnetization jumps to its saturation value. It should be nevertheless mentioned that the most striking magnetization curves can be detected at moderate values of the interaction ratio  $0.5 < J_1/J \lesssim 0.64$ , which may involve a continuous change of the magnetization in between the intermediate plateaus due to the presence of the gapless spin-liquid ground states.

#### 4.3. Bipartite entanglement

It is quite evident from the Ising character of the inter-rung interaction assumed within the spin-1/2 Ising-Heisenberg triangular tube that there is no correlation between transverse components of two spins from neighboring triangular cells. As a result, the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube does not exhibit quantum correlations between spins from distinct triangular units in contrast to the spins belonging to the same triangular unit, which may display a quantum entanglement due to a quantum character of the Heisenberg intra-rung coupling. With this background, we have computed for all available ground states the longitudinal and transverse components of the correlation function between two

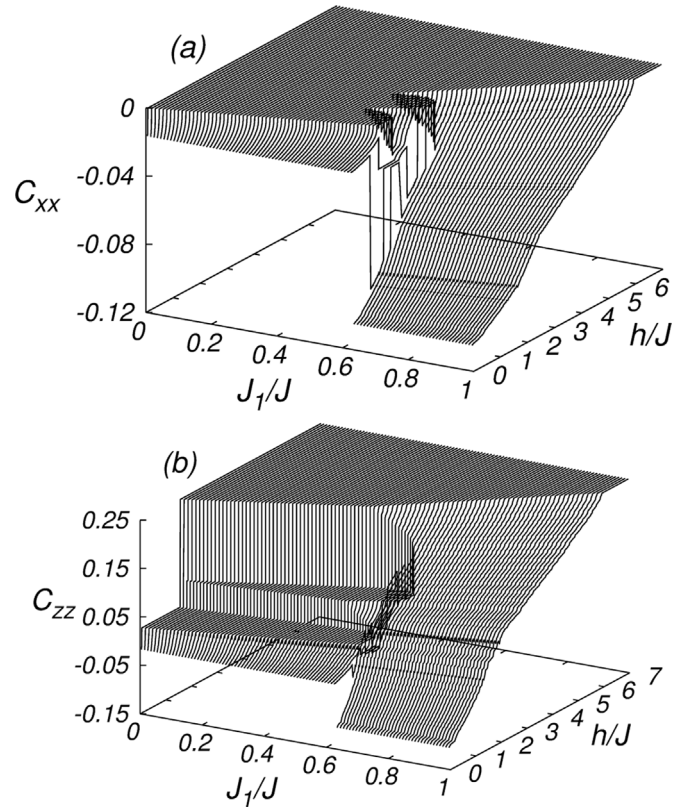


**Fig. 4.** The concurrence for two spins coupled within the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube through the Heisenberg intra-triangle interaction as a function of the interaction ratio  $J_1/J$  and the magnetic field  $h/J$ .

spins from the same triangular unit along with the local magnetization in order to determine from Eq. (9) the concurrence as a quantum entanglement estimator. The resulting diagram for the concurrence is plotted in Fig. 4. As it could be expected, there is no quantum entanglement in the classical ground states CF and CAF, while the other four ground states QAF, QFO, MFI and MFO display quantum correlations evidenced by non-zero concurrence. Two spatial components of the pair correlation function and local magnetization for any two spins from the same triangular unit equal within the ground states QAF and QFO to  $C_{xx} = C_{zz} = -1/12$  and  $m = \pm 1/6$ , which implies the following value  $C = 1/3$  of the concurrence. Though any two spins from the same triangular cell are quantum-mechanically entangled, the bipartite entanglement is incomplete due to the Heisenberg intra-rung coupling with the third spin. Quantum entanglement and frustration on clusters with integer spins has been recently investigated showing also distinct trends in the various ordered phases [29].

The more subtle situation can be observed within the mixed classical-quantum ground states MFI and MFO, where the bipartite entanglement between two spins from the same triangular unit basically depends on a regular alternation of the classical state  $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$  with the quantum state  $|\pm 1/2, L \text{ or } R\rangle$ , see the eigenvectors (19) and (20). Of course, the former classical state  $|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$  is consistent with the absence of quantum correlations  $C=0$  in accordance with  $C_{xx} = 0$ ,  $C_{zz} = 1/4$  and  $m = 1/2$ , while the latter quantum state  $|\pm 1/2, L \text{ or } R\rangle$  indicates the same incomplete bipartite entanglement  $C=1/3$  as reported for the ground states QAF and QFO with regard to  $C_{xx} = C_{zz} = -1/12$  and  $m = \pm 1/6$ . Thus, one may conjecture for the modulated classical-quantum ground states MFI and MFO the mean value of the concurrence  $C = 1/6$ , which measures the bipartite entanglement between two spins from the same triangular unit.

The most profound difference between the spin-1/2 Ising-Heisenberg and Heisenberg tube is that the former spin model shows absence of quantum correlations between the spins from distinct triangular unit cells in contrast with the latter fully quantum spin model. To clarify this issue in a more detail, we have calculated for the spin-1/2 Heisenberg tube using the DMRG method two spatial components of the pair correlation function between the spins from neighboring triangular units. The corresponding results for the correlation functions  $C_{xx} = \langle \hat{S}_{i,j}^x \hat{S}_{i+1,j}^x \rangle$  and  $C_{zz} = \langle \hat{S}_{i,j}^z \hat{S}_{i+1,j}^z \rangle$  are plotted in Fig. 5 against the interaction ratio  $J_1/J$  and the magnetic field  $h/J$ . As could be expected, the correlation functions  $C_{xx}$  and  $C_{zz}$  exhibit plateaus in the parameter region



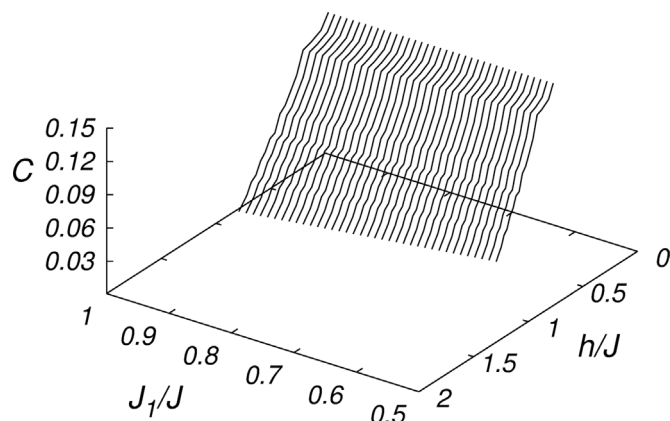
**Fig. 5.** Both spatial components of the inter-rung pair correlation function  $C_{xx}$  and  $C_{zz}$  as a function of the interaction ratio  $J_1/J$  and the magnetic field  $h/J$  within the spin-1/2 Heisenberg tube.

corresponding to the gapful ground states, while they show a continuous variation within the parameter space corresponding to the gapless ground states. Apparently, the transverse correlation  $C_{xx}$  between the spins from neighboring triangular units equals zero in all gapful ground states, which excludes a possible occurrence of the respective bipartite entanglement.

The quantum entanglement between the spins from neighboring unit cells can be accordingly found just within the gapless ground states. Fig. 6 illustrates typical dependences of the concurrence on the interaction ratio  $J_1/J$  and the magnetic field  $h/J$ , which serve in evidence of the quantum entanglement in the gapless ground state described by the effective spin-3/2 Heisenberg chain. It is quite evident from Fig. 6 that the concurrence monotonically decreases with the magnetic field due to a gradual degradation of quantum fluctuations and reinforcement of the spin polarization. It should be pointed out, however, that the concurrence vanishes well before the magnetization reaches the full polarization. Another interesting observation is that the spins from neighboring triangular units are not quantum-mechanically entangled within the other gapless ground state, which correspond to the effective spin-1/2 Heisenberg chain. This finding is rather surprising with respect to stronger quantum fluctuations of the effective spin-1/2 Heisenberg chain, which substantially suppress the relative strength of both spatial components  $C_{xx}$  and  $C_{zz}$  of the pair correlation function between the spins from neighboring triangular units (see Fig. 5).

## 5. Conclusion

In summary, we have provided a detailed comparison of the ground-state properties of the frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg



**Fig. 6.** The concurrence between two spins from neighboring triangular units of the spin-1/2 Heisenberg tube as a function of the interaction ratio  $J_1/J$  and the magnetic field  $h/J$ . The incomplete entanglement, which occurs just within the gapless ground state corresponding to the effective spin-3/2 Heisenberg chain, is gradually suppressed as the magnetic field strengthens.

and Heisenberg triangular tubes in a presence of the external magnetic field, which differ from each other by character of the inter-rung interaction (Ising vs. Heisenberg). All available ground states of the spin-1/2 Ising-Heisenberg triangular tube were rigorously found and the overall ground-state phase diagram constructed. The ground-state phase diagram of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube involves the four quantum ground states QAF, QFO, MFI and MFO in addition to two classical ground states CAF and CF. Each couple of the spins from one and the same triangular unit is quantum-mechanically entangled within the ground states QAF and QFO, while the quantum entanglement between the nearest-neighbor spins is only present in each second triangular unit within the mixed classical-quantum ground states MFI and MFO. The quantum entanglement between the nearest-neighbor spins from the same triangular unit cell was confirmed through the non-zero value of the concurrence serving as a measure of bipartite entanglement.

To compare with, the ground-state phase diagram of the spin-1/2 Heisenberg triangular tube constructed on the grounds of DMRG calculations [17] includes in total one classical ground state, three gapped quantum ground states and three gapless quantum ground states. The classical ground state and two gapped quantum ground states can be exactly identified with the three ground states CF, QFO and MFO of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube. Owing to this fact, there is a perfect coincidence between the ground-state phase diagrams of the spin-1/2 Ising-Heisenberg and Heisenberg tube in a parameter region  $J_1/J < 1/2$  and  $h > 2J_1$  inherent to those ground states. In the rest of the parameter space, there appear substantial differences connected mainly with a presence of gapless quantum ground states with a spin-liquid character. Consequently, the magnetization scenario of the spin-1/2 Heisenberg tube is much more miscellaneous in comparison with the magnetization process of the spin-1/2 Ising-Heisenberg tube, which always involves the zero, one-third and two-thirds plateaus and respective magnetization jumps in between them.

The magnetization curve of the spin-1/2 Heisenberg tube never contains just the plateau at zero magnetization, but it may contain or not the intermediate one-third and two-thirds plateaus of different origin depending on the relative strength of the inter-rung and intra-rung coupling constants. In addition, the spin-1/2 Heisenberg tube may exhibit bipartite entanglement evidenced by non-zero concurrence between spins from distinct triangular unit cells within the gapless spin-liquid ground state.

## Acknowledgements

This work was partially supported by CNPq, CAPES, and FINEP (Federal Brazilian Agencies), CNPq-Rede Nanobioestruturas, as well as FAPEAL (Alagoas State Agency). R.C.A. thanks CAPES for financial support, and Faculty of Science of P. J. Šafárik University in Košice - Slovakia for the afforded hospitality. J.S. acknowledges financial support of Ministry of Education of Slovak Republic provided under the VEGA grant No. 1/0043/16 and by the grant of the Slovak Research and Development Agency under the contract Nos. APVV-0097-12 and APVV-14-0073.

## References

- [1] C. Lacroix, Ph. Mendels, F. Mila, *Introduction to Frustrated Magnetism*, Springer, Heidelberg, 2011.
- [2] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* 80 (2008) 517.
- [3] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki, *Rev. Mod. Phys.* 82 (2009) 865.
- [4] G. Toulouse, *Commun. Phys.* 2 (1977) 115.
- [5] H.T. Diep, *Frustrated Spin Systems*, World Scientific, Singapore, 2004.
- [6] M.P. Gelfand, *Phys. Rev. B* 43 (1991) 8644.
- [7] Y. Xian, *J. Phys. : Condens. Matter.* 6 (1994) 5965.
- [8] Y. Xian, *Phys. Rev. B* 52 (1995) 12485.
- [9] E.H. Kim, O. Legeza, J. Solyom, *Phys. Rev. B* 77 (2008) 205121.
- [10] M. Sato, *Phys. Rev. B* 72 (2005) 104438.
- [11] B. Sutherland, *Phys. Rev. B* 62 (2000) 11499.
- [12] R. Citro, E. Orignac, N. Andrei, C. Itoi, S. Qin, *J. Phys. : Condens. Matter* 12 (2000) 3041.
- [13] R.-X. Li, S.-L. Wang, Y. Ni, K.-L. Yao, H.-H. Fu, *Phys. Lett. A* 378 (2014) 970.
- [14] M. Takigawa, F. Mila, *Introduction to Frustrated Magnetism*, C. Lacroix, Ph. Mendels, F. Mila, (eds.), Springer, Heidelberg, 2011, pp.241–269.
- [15] M. Oshikawa, M. Yamanaka, I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* 78 (1997) 1984.
- [16] I. Affleck, *Phys. Rev. B* 37 (1998) 5186.
- [17] A. Honecker, F. Mila, M. Troyer, *Eur. Phys. J. B* 15 (2000) 227.
- [18] J. Schnack, H. Nojiri, P. Kögerler, G.J.T. Cooper, L. Cronin, *Phys. Rev. B* 70 (2004) 174420.
- [19] N.B. Ivanov, J. Schnack, R. Schnalle, J. Richter, P. Kögerler, G.N. Newton, G.J. T. Cooper, L. Cronin, Y. Oshima, H. Nojiri, *Phys. Rev. Lett.* 105 (2010) 037206.
- [20] M. Sato, *Phys. Rev. B* 75 (2007) 174407.
- [21] M. Sato, T. Sakai, *Phys. Rev. B* 75 (2007) 014411.
- [22] T. Sakai, M. Sato, K. Okunishi, Y. Otsuka, K. Okamoto, C. Itoi, *Phys. Rev. B* 78 (2008) 184415.
- [23] J. Strečka, R.C. Alécio, M.L. Lyra, O. Rojas, *J. Magn. Magn. Mater.* 409 (2016) 124.
- [24] W.K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 2245.
- [25] L. Amico, A. Osterloh, F. Plastina, R. Fazio, *Phys. Rev. A* 69 (2004) 022304.
- [26] H.L. Huang, B. Wang, Z.Y. Sun, S.P. Kou, *Chin. Phys. Lett.* 185 (2014) 30.
- [27] S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* 69 (1992) 19.
- [28] B. Bauer, et al., *J. Stat. Mech.* P05001 (2011).
- [29] V.S. Abgaryan, N.S. Ananikian, L.N. Ananikyan, A.N. Kocharian, *Phys. Scr.* 83 (2011) 055702.



Anexo **C**

Terceiro Artigo Publicado

# Magnetization plateaus and enhanced magnetocaloric effect in a frustrated spin- $\frac{1}{2}$ Ising-Heisenberg triangular tube

Raphael C. Alécio<sup>1</sup>, Marcelo L. Lyra<sup>1</sup>, Jozef Strečka<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-970, Maceió-AL, Brazil

<sup>2</sup>Department of Theoretical Physics and Astrophysics, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Park Angelinum 9, 040 01 Košice, Slovakia

**Abstract.** The frustrated spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg triangular tube with Heisenberg intra-rung and Ising inter-rung interactions is exactly solved in a longitudinal magnetic field by taking advantage of the local conservation of the total spin on each triangular rung and the transfer-matrix method. We have rigorously calculated the ground-state phase diagram, magnetization process, entropy, pair correlations, specific heat and iso-entropic curves. The stepwise magnetization curves display magnetization jumps and intermediate plateaus due to discontinuous field-driven phase transitions, which are also reflected in the anomalous thermodynamic behavior as for instance a striking low-temperature peak of the specific heat and an enhanced magnetocaloric effect.

PACS numbers: 00.00, 20.00, 42.10

*Keywords:* spin tube, geometric frustration, magnetization plateau, magnetocaloric effect Submitted to: *J. Phys.: Condens. Matter*

## 1. Introduction

Exactly soluble quantum models are important in several physical contexts, such as condensed matter, quantum information and communication. These models often produce new information on aspects related to cooperative phenomena that would be difficult to understand through approximate approaches [1, 2, 3]. Despite considerable efforts, a complete and rigorous solution for most realistic quantum spin systems beyond the present stage of human understanding.

Exactly solvable spin models are providing new scenarios for the development and testing of new forms of unusual physical behaviors including magnetization plateaus, enhanced magnetocaloric effect, quantum entanglement and non-locality effects, which have been observed in several compounds [1, 4]. Exactly solvable models thus enhance our capability to develop a precise microscopic description of actual physical properties observed in experiments [5]. Within this context, there is a great variety of chemical compounds retaining similar magnetic structure to a spin ladder [6] as for instance several cuprates  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$ ,  $\text{LaCuO}_{2.5}$  [7],  $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$  [8],  $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$  [9],  $(5\text{IAP})_2\text{CuBr}_4$  [10] or vanadium oxides  $\text{CaV}_2\text{O}_5$  and  $\text{MgV}_2\text{O}_5$  [11].

An important feature of low-dimensional antiferromagnetic quantum spin systems is a respective zero-temperature magnetization curve, which usually exhibits a continuous growth as a function of the external magnetic field. However, under certain conditions, the magnetization curve may also exhibit horizontal plateaus at certain rational values of the magnetization. This phenomenon is quite analogous to the quantum Hall effect, in which the electrical resistivity exhibits plateaus as a function of the external magnetic field. Oshikawa *et al.* [12] found a necessary condition for the occurrence of fractional magnetization plateaus in one-dimensional quantum spin models according to which:

$$(S_u - m_u)p \in \text{integer}, \quad (1)$$

where  $p$  is the ground-state period,  $S_u$  and  $m_u$  are the total spin and the total magnetization of the unit cell, respectively. The quantization condition (1) would suggest that the number of available plateaus can be increased either by the increase of the total spin per unit cell  $S_u$  or by breaking of the translational

symmetry when increasing the ground-state period  $p$ . Note that the quantization condition (1) is necessary but not sufficient, since not all predicted plateaus need not be necessarily realized.

In this paper we will determine the thermodynamic behavior of a frustrated spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg tube composed of triangular unit cells in a presence of external magnetic field. In the triangular unit, the three quantum spins are connected through the Heisenberg exchange coupling with  $XXZ$  symmetry. Each spin belonging to the unit cell  $i$  is connected to all spins of the posterior cell  $i+1$  through an Ising-like exchange coupling [13, 14], as shown in figure 1. The model is analytically solved by exploring the local conservation of the total spin on each rung and the transfer-matrix method. We will be particularly interested in investigating the possible presence of magnetization plateaus induced by the local frustration of the antiferromagnetic triangular unit and in identifying thermodynamic signatures of the discontinuous quantum phase transitions driven by the rising external magnetic field.

The organization of this paper is as follows. The frustrated spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg tube is introduced in Sec. 2 along with its exact analytical treatment. The most interesting results for the ground state, magnetization process, entropy, specific heat, pair correlation functions and magnetocaloric effect are presented in Sec. 3. Finally, a few concluding remarks are drawn in Sec. 4.

## 2. Exact solution of the Ising-Heisenberg tube

The Hamiltonian of a spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg triangular tube in the presence of an external magnetic field can be defined as:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 \left[ J_x \left( S_{i,j}^x S_{i,j+1}^x + S_{i,j}^y S_{i,j+1}^y \right) + J_z S_{i,j}^z S_{i,j+1}^z \right] \\ & + J_1 \sum_{i=1}^N \left( \sum_{j=1}^3 S_{i,j}^z \right) \left( \sum_{j=1}^3 S_{i+1,j}^z \right) - h \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 S_{i,j}, \quad (2) \end{aligned}$$

where  $S_{i,j}^\alpha$  ( $\alpha \in \{x, y, z\}$ ) denote spatial components of a spin- $\frac{1}{2}$  operator, the subscript  $j$  labels one of three vertices from the  $i$ -th triangular unit and the constraints  $S_{N+1,j} \equiv S_{1,j}$  and  $S_{i,4} \equiv S_{i,1}$  ensure a periodic boundary condition. The interaction terms  $J_x$  and  $J_z$  determine the anisotropic  $XXZ$  Heisenberg interaction within the triangular unit

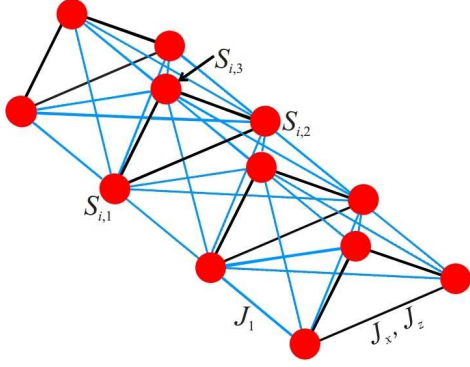


Figure 1: A diagrammatic representation of the frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg triangular tube. Thick (black) lines represent the XXZ Heisenberg intra-rung coupling ( $J_x$ ,  $J_z$ ), while thin (blue) lines correspond to the Ising inter-rung coupling ( $J_1$ ).

cell, the interaction term  $J_1$  represents the Ising-like coupling between spins from neighboring unit cells and the last term  $h$  incorporates the effect of external magnetic field.

It is worthwhile to remark that the Hamiltonian (2) belongs to a class of frustrated spin-ladder models introduced in Ref. [6]. The general feature of the spin-ladder models [6] is that their Hamiltonians can alternatively be rewritten in terms of the total spin of the unit cell  $\mathbf{T}_i = \sum_{j=1}^3 \mathbf{S}_{i,j}$  and its  $z$ -component  $T_i^z = \sum_{j=1}^3 S_{i,j}^z$ , which simultaneously represent conserved quantities with well defined quantum spin numbers. Our further focus will be therefore at diagonalization of the Hamiltonian (2) under periodic boundary conditions ensuring a translational invariance. A convenient mathematical shortcut simplifying further treatment affords the algebraic identity:

$$(T_i^\alpha)^2 = \frac{3}{4} - 2(S_{i,1}^\alpha S_{i,2}^\alpha + S_{i,1}^\alpha S_{i,3}^\alpha + S_{i,2}^\alpha S_{i,3}^\alpha), \quad (3)$$

$$\begin{pmatrix} q^3 r^9 u^9 s^3 & q^5 r^5 u^3 s^2 & q^5 r^5 u^{-3} s & q^3 r^9 u^{-9} & q^2 u^5 z^3 s^2 & q^2 r^5 u^{-3} s & q^2 r^5 u^3 s^2 & q^2 r^5 u^{-3} s \\ q^5 r^5 u^3 s^2 & q^7 r u s & q^7 r u^{-1} & q^5 r^5 u^{-3} s^{-1} & q^4 r u s & q^4 r u^{-1} & q^4 r u s & q^4 r u^{-1} \\ q^5 r^5 u^{-3} s & q^7 r u^{-1} & q^7 r u s^{-1} & q^5 r^5 u^3 s^{-2} & q^4 r u^{-1} & q^4 y z s^{-1} & q^4 y z^{-1} & q^4 y z s^{-1} \\ q^3 r^9 u^{-9} & q^5 r^5 u^{-3} s^{-1} & q^5 r^5 u^3 s^{-2} & q^3 r^9 u^9 s^{-3} & q^2 r^5 u^{-3} s^{-1} & q^2 r^5 u^3 s^{-2} & q^2 r^5 u^{-3} s^{-1} & q^2 r^5 u^3 s^{-2} \\ q^2 r^5 u^3 s^2 & q^4 r u s & q^4 r u^{-1} & q^2 r^5 u^{-3} s^{-1} & q r u s & q r u^{-1} & q r u s & q r u^{-1} \\ q^2 r^5 u^{-3} s & q^4 r u^{-1} & q^4 r u s^{-1} & q^2 r^5 u^3 s^{-2} & q r u^{-1} & q r u s^{-1} & q r u^{-1} & q r u s^{-1} \\ q^2 r^5 u^3 s^2 & q^4 r u s & q^4 r u^{-1} & q^2 r^5 u^{-3} s^{-1} & q r u s & q r u^{-1} & q r u s & q r u^{-1} \\ q^2 r^5 u^{-3} s & q^4 r u^{-1} & q^4 r u s^{-1} & q^2 r^5 u^3 s^{-2} & q r u^{-1} & q r u s^{-1} & q r u^{-1} & q r u s^{-1} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

where  $q = e^{-\frac{\beta J_z}{4}}$ ,  $r = e^{-\frac{\beta J_x}{8}}$ ,  $s = e^{\frac{\beta h}{2}}$  and  $u = e^{-\frac{\beta J_1}{4}}$ . In the thermodynamic limit  $N \rightarrow \infty$ , the partition function is given in terms of the largest eigenvalue

in terms of which the Hamiltonian (2) can be rewritten to the following form:

$$\mathcal{H} = -\frac{3N}{8}(2J_x + J_z) + \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i. \quad (4)$$

Here, the first term represents less important constant that simply rescales the energy and the second term is written as a sum over the most symmetric local Hamiltonians  $\mathcal{H}_i$  depending on quantum spin numbers from two consecutive unit cells:

$$\mathcal{H}_i = J_1 T_i^z T_{i+1}^z + \frac{J_x}{4} [T_i(T_i + 1) + T_{i+1}(T_{i+1} + 1)] + \frac{J_z - J_x}{4} [(T_i^z)^2 + (T_{i+1}^z)^2] - \frac{h}{2} (T_i^z + T_{i+1}^z), \quad (5)$$

whereas  $T_i^z = -T_i, -T_i + 1, \dots, T_i$ . The local Hamiltonians obviously commute with each other, i.e.  $[\mathcal{H}_i, \mathcal{H}_j] = 0$ , by virtue of which one may employ classical transfer-matrix method to obtain the main thermodynamic quantities of interest. In addition, the diagonal form of the Hamiltonian (5) can be straightforwardly used to obtain all possible ground states. The canonical partition function follows from the standard procedure:

$$\begin{aligned} Z &= \mathbf{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} = e^{\frac{3N\beta}{8}(2J_x + J_z)} \mathbf{Tr} \prod_{i=1}^N e^{-\beta \mathcal{H}_i} \\ &= e^{\frac{3N\beta}{8}(2J_x + J_z)} \sum_{\{T_i, T_i^z\}} \prod_{i=1}^N \mathbf{T}(T_i, T_i^z; T_{i+1}, T_{i+1}^z) \\ &= e^{\frac{3N\beta}{8}(2J_x + J_z)} \mathbf{Tr} (\mathbf{T})^N, \end{aligned} \quad (6)$$

where  $\beta = 1/(k_B T)$ ,  $k_B$  is Boltzmann's constant,  $T$  is the absolute temperature and the summation  $\sum_{\{T_i, T_i^z\}}$  is carried out over all available values of quantum spin numbers. The expression  $\mathbf{T}(T_i, T_i^z; T_{i+1}, T_{i+1}^z)$  can be formally viewed as the transfer matrix given by:

$$\mathbf{T}(T_i, T_i^z; T_{i+1}, T_{i+1}^z) = \langle T_i, T_i^z | e^{-\beta \mathcal{H}_i} | T_{i+1}, T_{i+1}^z \rangle =$$

of the transfer matrix (7). All eigenvalues can be calculated by solving the characteristic equation:

$$\det(\mathbf{T} - \lambda \mathbf{I}) = 0, \quad (8)$$

where  $\mathcal{I}$  stands for eight-by-eight unity matrix. Using standard properties of determinants [15] one may find that four out of eight transfer-matrix eigenvalues equal zero ( $\lambda_8 = \lambda_7 = \lambda_6 = \lambda_5 = 0$ ).

The other four transfer-matrix eigenvalues are obtained as roots of the fourth-order polynomial equation:

$$\lambda^4 + A\lambda^3 + B\lambda^2 + C\lambda + D = 0, \quad (9)$$

whose coefficients are respectively:

$$A = qru \left[ q^2 r^8 u^8 \cosh\left(\frac{3\beta h}{2}\right) + 2(q^6 + 2) \times \cosh\left(\frac{\beta h}{2}\right) \right], \quad (10)$$

$$B = 2q^2 r^2 \left\{ q^2 r^8 (q^6 + 2) \left[ u^6 (u^4 - 1) \cosh(2\beta h) + (u^{10} - u^{-6}) \cosh(\beta h) \right] - q^4 r^{16} \sinh\left(\frac{9\beta J_1}{2}\right) - (q^6 + 2)^2 \sinh\left(\frac{\beta J_1}{2}\right) \right\}, \quad (11)$$

$$C = 4(q^6 + 2) r^{11} q^5 \left\{ q^2 r^8 u \left[ \sinh\left(\frac{9\beta J_1}{2}\right) - u \sinh(3\beta J_1) - u^2 \sinh\left(\frac{3\beta J_1}{2}\right) \right] \cosh\left(\frac{\beta h}{2}\right) + \left[ u^9 (q^6 + 2) \sinh\left(\frac{\beta J_1}{2}\right) - u^3 \sinh(\beta J_1) + u^{-3} \sinh\left(\frac{\beta J_1}{2}\right) \right] \cosh\left(\frac{3\beta h}{2}\right) \right\}, \quad (12)$$

$$D = 4(q^6 + 2)^2 q^8 r^{20} \left\{ \sinh\left(\frac{3\beta J_1}{2}\right) \left[ \sinh\left(\frac{3\beta J_1}{2}\right) + 2 \sinh\left(\frac{\beta J_1}{2}\right) \right] + \sinh\left(\frac{9\beta J_1}{2}\right) \sinh\left(\frac{\beta J_1}{2}\right) - 2 \sinh(3\beta J_1) \sinh(\beta J_1) \right\}. \quad (13)$$

The Helmholtz free energy per unit cell is in the thermodynamic limit  $N \rightarrow \infty$  determined by the largest eigenvalue  $\lambda_{max} = \max\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\}$ :

$$f = -\beta^{-1} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z = -\frac{3(2J_x + J_z)}{8} - \beta^{-1} \ln \lambda_{max}. \quad (14)$$

All other thermodynamic quantities such as entropy, magnetization and specific heat can be calculated from the Helmholtz free energy (14) by numerical differentiation. In addition, two spatial components of the pair correlation function between spins from the same triangular unit are given by

$$C_{11}^{ZZ} = \frac{1}{3Z} \text{Tr} \left[ \sum_{j=1}^3 S_{j,i}^z S_{j+1,i}^z e^{-\beta \mathcal{H}} \right] = -\frac{1}{3} \left( \frac{\partial f}{\partial J_z} \right)_T \quad (15)$$

$$C_{11}^{XX} = \frac{1}{3Z} \text{Tr} \left[ \sum_{j=1}^3 S_{j,i}^x S_{j+1,i}^x e^{-\beta \mathcal{H}} \right] = \frac{1}{3Z} \text{Tr} \left[ \sum_{j=1}^3 S_{j,i}^y S_{j+1,i}^y e^{-\beta \mathcal{H}} \right] = -\frac{1}{6} \left( \frac{\partial f}{\partial J_x} \right)_T \quad (16)$$

while the pair correlation between spins from neighboring triangular cells is obtained from:

$$C_{1,2}^{ZZ} = \frac{1}{9Z} \text{Tr} \left[ \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 S_{j,i}^z S_{k,i+1}^z e^{-\beta \mathcal{H}} \right] = -\frac{1}{9} \left( \frac{\partial f}{\partial J_1} \right)_T \quad (17)$$

### 3. Results and discussion

In this section, let us proceed to a discussion of the most interesting results for the frustrated spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg triangular tube in an applied external magnetic field by assuming the particular case with the antiferromagnetic interactions. For simplicity, our attention will be henceforth paid to the special case of the spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg tube with the isotropic Heisenberg intra-rung interaction  $J_x = J_z = J$ , which illustrates all generic features of the more general model with the anisotropic XXZ Heisenberg coupling.

#### 3.1. Ground-state phase diagram

All possible ground states of the spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg tube can be straightforwardly obtained from the diagonalized form of the Hamiltonian (4) after taking into consideration all available combinations of quantum spin numbers involved therein. By inspection, one finds six different ground states: the classical antiferromagnetic phase (CAF)

$$|\text{CAF}\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j-1} \otimes |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle_{2j-1} \otimes |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j} \end{cases}, \quad (18)$$

the classical ferromagnetic phase (CFO)

$$|\text{CFO}\rangle = \prod_{i=1}^N |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_i, \quad (19)$$

the quantum antiferromagnetic phase (QAF)

$$|\text{QAF}\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j-1} \otimes \left| -\frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} \left| -\frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j-1} \otimes \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_{2j} \end{cases}, \quad (20)$$

the quantum ferromagnetic phase (QFO)

$$|\text{QFO}\rangle = \prod_{j=1}^N \left| \frac{1}{2}, L \text{ or } R \right\rangle_j, \quad (21)$$

the mixed classical-quantum ferrimagnetic phase (MFI)

$$|\text{MFI}\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j-1} \otimes |-\frac{1}{2}, L \text{ or } R\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} |-\frac{1}{2}, L \text{ or } R\rangle_{2j-1} \otimes |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j} \end{cases}, \quad (22)$$

and the mixed classical-quantum ferromagnetic phase (MFO)

$$|\text{MFO}\rangle = \begin{cases} \prod_{j=1}^{N/2} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j-1} \otimes |\frac{1}{2}, L \text{ or } R\rangle_{2j} \\ \prod_{j=1}^{N/2} |\frac{1}{2}, L \text{ or } R\rangle_{2j-1} \otimes |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle_{2j} \end{cases}. \quad (23)$$

In above, we have used the following notation for the eigenvectors of the  $j$ -th Heisenberg spin triangle  $|\pm 1/2, R\rangle_j$  and  $|\pm 1/2, L\rangle_j$  with the total spin  $T_j^z = \pm 1/2$  and two opposite (right- and left-hand) chiralities

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, R \right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \right)_j \\ \left| \frac{1}{2}, L \right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \right)_j \\ \left| -\frac{1}{2}, R \right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right)_j \\ \left| -\frac{1}{2}, L \right\rangle_j &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left( |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + e^{\frac{4i\pi}{3}} |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + e^{\frac{2i\pi}{3}} |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \right)_j \end{aligned} \quad (24)$$

The corresponding eigenenergies per elementary triangular unit (Heisenberg spin triangle) are given by

$$\begin{aligned} E_{\text{CAF}} &= -\frac{9J_1}{4} + \frac{3J}{4}, \\ E_{\text{CFO}} &= \frac{9J_1}{4} + \frac{3J}{4} - \frac{3h}{2}, \\ E_{\text{QAF}} &= -\frac{J_1}{4} - \frac{3J}{4}, \\ E_{\text{QFO}} &= \frac{J_1}{4} - \frac{3J}{4} - \frac{h}{2}, \\ E_{\text{MFI}} &= -\frac{3J_1}{4} - \frac{h}{2}, \\ E_{\text{MFO}} &= \frac{3J_1}{4} - h. \end{aligned} \quad (25)$$

It is quite obvious from the eigenvectors (18)-(23) that the four ground states CAF, QAF, MFI and MFO have a translationally-broken symmetry due to the antiferromagnetic coupling between spins from neighboring triangular units in contrast to the other two ground states CFO and QFO, which are translationally invariant. In addition, the chiral degrees of freedom of the Heisenberg spin triangles within the eigenstates (24) with the total spin  $T_j = \frac{1}{2}$  are responsible for a macroscopic degeneracy of the

ground states QAF, QFO, MFI and MFO. The ground state QAF has the largest residual entropy  $S = (N + 1)k_B \ln 2$  due to a mutual interplay of translationally broken symmetry and chiral degrees of freedom, the ground state QFO has the residual entropy  $S = Nk_B \ln 2$  originating solely from the chiral degrees of freedom, while the latter two ground states MFI and MFO have the residual entropy  $S = (N/2 + 1)k_B \ln 2$  coming from the translationally broken symmetry and chiral degrees of freedom.

The ground-state phase diagram of the spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg triangular tube is depicted in Fig. 2. At zero magnetic field  $h = 0$  the antiferromagnetic phases QAF and CAF with a zero net magnetization emerge as the only two possible ground states. The ground state QAF of a quantum character is stable in a parameter region with the predominant Heisenberg intra-rung interaction  $J_1/J < 3/4$ , while the ground state CAF of a classical nature is stable in a parameter region with the predominant Ising inter-rung interaction  $J_1/J > 3/4$ . Of course, the antiferromagnetic order inherent to the ground states QAF or CAF breaks down when the external magnetic field approaches its first critical value  $h_{c1}$ , above which another two unusual quantum ground states QFO and MFI appear. It is evident from Fig. 2 that the ground state QAF turns to the QFO phase at the critical field  $h_{c1} = J_1$ , while the ground state CAF evolves into the MFI phase at the critical field  $h_{c1} = 3J_1 - 3J/2$ . The ground states QFO and MFI are stable at moderate values of the magnetic field ranging up to the second critical fields  $h_{c2} = J_1 + 3J/2$  and  $3J_1$ , respectively, which represent a lower boundary for a presence of the ground state MFO with a modulated ferromagnetic character. Finally, all spins are forced to align within the fully polarized ground state CF for the stronger magnetic fields than the saturation field  $h_{c3} = 3J_1 + 3J/2$ .

### 3.2. Magnetization process

Next, let us examine the temperature dependence of the magnetization curves of the spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg triangular tube. According to the Oshikawa-Yamanaka-Affleck rule [12], the spin-1/2 triangular tube may possibly display intermediate magnetization plateaus at zero, one-third and two-thirds of the saturation magnetization. It can be seen from Fig. 3 that the spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg tube exhibits all available magnetization plateaus. More specifically, the antiferromagnetic ground states QAF and CAF are responsible for a trivial plateau with zero net magnetization, the ground states QFO and MFI are pertinent to the intermediate one-third magnetization plateau and finally, the ground state MFO is the respective realization of the two-thirds

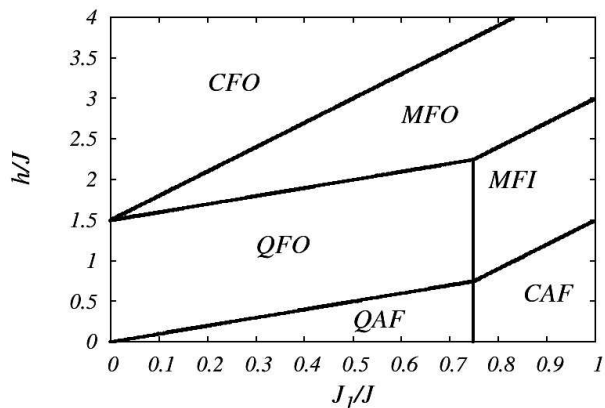


Figure 2: The ground-state phase diagram of the spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg tube in  $\frac{J_1}{J} - \frac{h}{J}$  plane, which involves six distinct gapped ground states (for details see the text).

magnetization plateau. Hence, it follows that the zero, one-third and two-thirds magnetization plateaus are always present in the zero-temperature magnetization curve of the spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg tube even though the underlying mechanism for the plateau formation basically depends on whether the interaction ratio is greater or smaller than the specific value  $J_1/J = 3/4$ . In the latter case  $J_1/J < 3/4$ , the zero and one-third magnetization plateaus correspond to the ground states QAF and QFO, while the zero and one-third magnetization plateaus appear as a result of the ground states CAF and MFI in the former case  $J_1/J > 3/4$ . Another interesting point to observe from Fig. 3(b) is that all low-temperature magnetization curves coalesce above a half of the zero-temperature magnetization jump accompanying the field-driven transition from CAF phase to MFI phase, because this transition occurs from a classical two-fold degenerate phase (CAF) to a macroscopically degenerate quantum phase (MFI). On the other hand, the crossing point of low-temperature magnetization curves at the field-driven transition between the macroscopically degenerate QAF and QFO phases takes place at a half of the zero-temperature magnetization jump, because both these phases have the same degree of degeneracy. The crossing points of the low-temperature magnetization curves at all other field-induced transitions are below a half of the zero-temperature magnetization jump, since the rising magnetic field generally suppresses degeneracy.

### 3.3. Entropy and specific heat

To better characterize distinct degeneracies of the ground states, we have plotted in Fig. 4 temperature dependences of the entropy for some representative

values of the coupling ratio and magnetic field. In Fig. 4(a) for  $J_1/J = 0.6$ , thermal variations of the entropy at two lowest values of the external magnetic field  $h/J = 0.0$  and  $0.5$  correspond to the QAF ground state with the residual entropy  $S = Nk_B \ln 2$ . The third lowest magnetic field  $h/J = 1.5$  leads to the QFO ground state with the same residual entropy. On the contrary, two higher magnetic fields  $h/J = 2.5$  and  $3.2$  support the MFO ground state with a lower residual entropy  $S = (1/2)Nk_B \ln 2$ . Finally, the largest value of the magnetic field  $h/J = 4.0$  corresponds to the non-degenerate CFO ground state. In Fig. 4(b) for  $J_1/J = 0.8$ , one detects a distinct sequence of discontinuous field-driven phase transitions. At zero and low magnetic field  $h/J = 0.0$  and  $0.5$  one finds the non-degenerate CAF ground state without the residual entropy. The ground states MFI and MFO emerging at moderate values of the magnetic field have a quantum character with the same residual entropy  $S = (1/2)Nk_B \ln 2$ . At sufficiently high magnetic fields, one reaches the CFO ground state with a non-degenerate character.

Let us turn our attention to typical temperature dependences of the specific heat as displayed in Fig. 5 for a few selected values of the magnetic field. In Fig. 5(a) we have depicted the specific heat for the particular case with  $J_1/J = 0.6$  for which the zero-field ground state is the highly degenerate QAF phase. In this case, the specific heat exhibits a round and quite wide maximum due to thermal excitations from the highly degenerate ground state to less degenerate excited states. At zero magnetic field, the second round maximum is also visible at lower temperatures owing to a relatively small energy gap between the QAF and QFO states. Consequently, this second Schottky-type peak moves towards lower temperatures as the magnetic field strengthens, because a quantum phase transition between the QAF and QFO phases is gradually approached. Above the zero-temperature phase transition, the low-temperature peak is reduced in height as the QFO state has a lower degeneracy than the QAF state. For moderate values of the magnetic field the low-temperature peak is superimposed on the main round maximum as for instance for the specific case with  $h/J = 1.5$  in Fig. 5(a). Notice that the development of double-peak specific-heat curves always signals approaching of a discontinuous quantum phase transition. The specific heat exhibits qualitatively the same thermal behavior also for another particular case with  $J_1/J = 0.8$  as illustrated in Fig. 5(b). There is just one strikingly distinct feature, namely, the low-temperature peak of the specific heat may exhibit a remarkable height at low values of the magnetic field. An extremely high Schottky-type maximum can be attributed to a vigorous thermal excitations from a less

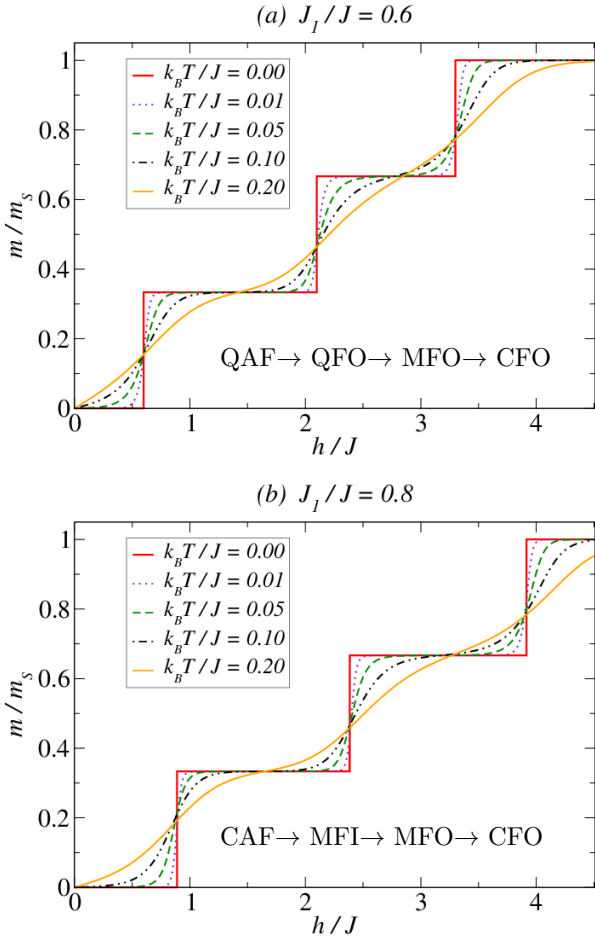


Figure 3: The magnetization normalized with respect to its saturation value against the magnetic field  $h/J$  for a few different temperatures and two representative values of the interaction ratio: (a)  $J_1/J = 0.6$ ; (b)  $J_1/J = 0.8$ . The intermediate  $1/3$ - and  $2/3$ -plateaus appear in both kinds of the magnetization curves irrespective of a specific sequence of the field-driven phase transitions.

degenerate ground state towards a highly degenerate excited state.

### 3.4. Correlation functions

To gain an overall insight into a character of spin arrangements emerging within the individual ground states, let us explore in detail the temperature dependence of some relevant pair correlation functions. It is quite evident from the Ising character of the inter-rung interaction that there is no correlation between transverse components of two spins from neighboring triangular cells of the spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg triangular tube. As a result, the spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg tube does not exhibit quantum

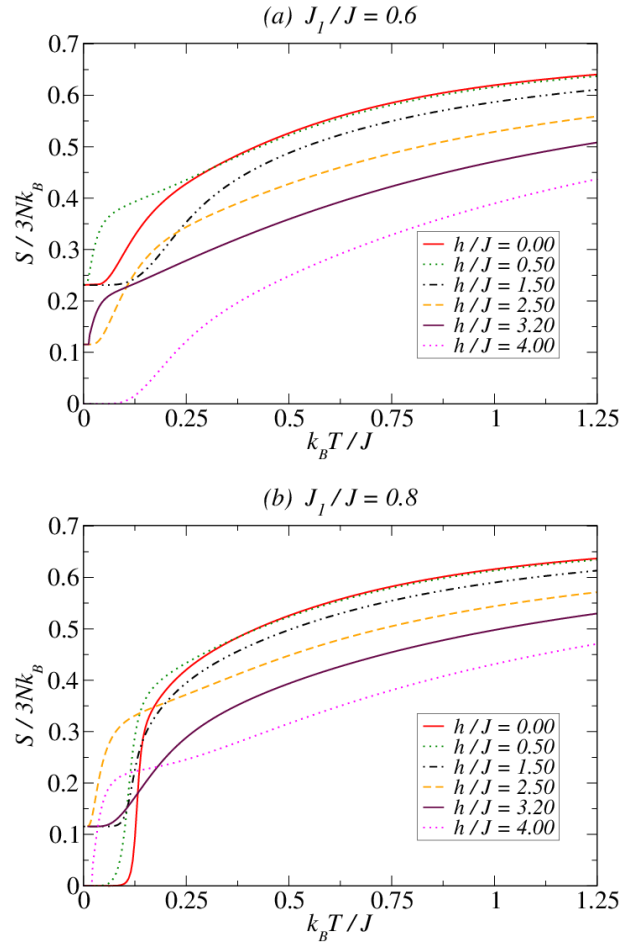


Figure 4: Thermal dependences of the entropy per spin for some representative values of the magnetic field and two different values of the interaction ratio: (a)  $J_1/J = 0.6$ ; (b)  $J_1/J = 0.8$ . Notice that the QAF and QFO phases have the residual entropy  $S/Nk_B = \ln 2$ , while the MFI and MFO phases have smaller residual entropy  $S/Nk_B = (1/2)\ln 2$ . Both CAF and CFO phases are without macroscopic degeneracy.

correlations between spins from distinct triangular units in contrast to the spins from the same triangular unit, which may become entangled due to the quantum character of the Heisenberg intra-rung coupling. With this background, we have computed longitudinal ( $C_{zz}$ ) and transverse ( $C_{xx}$ ) components of the correlation function between two spins from the same triangular unit for all available ground states, see Figs. 6 and 7. These pair correlation functions are plotted against the external magnetic field for a few different temperatures and two values of the interaction ratio used in our previous analysis ( $J_1/J = 0.6$  and  $J_1/J = 0.8$ ).

The transverse correlation function shows for  $J_1/J = 0.6$  [Fig. 6(a)] a single intermediate plateau corresponding to the MFO ground state. Both QAF



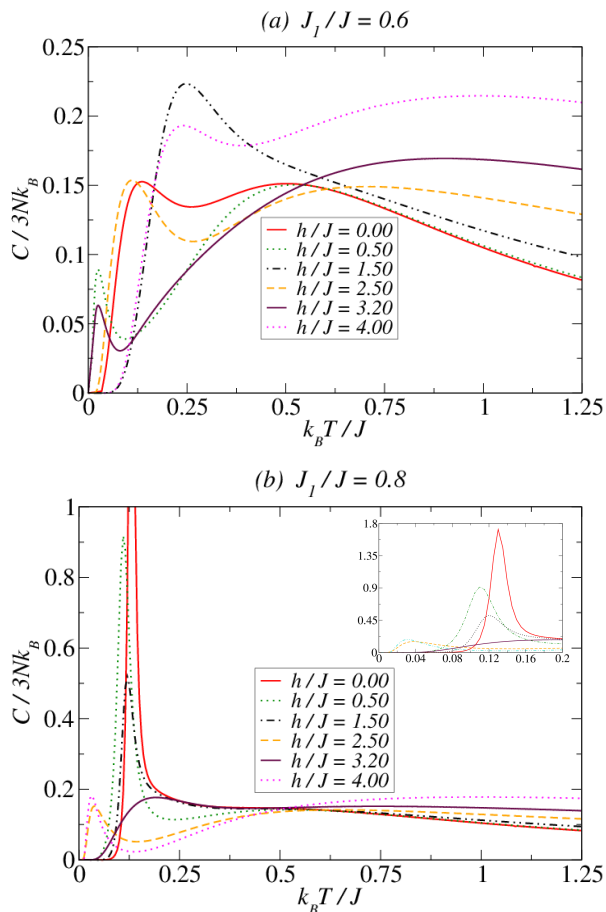


Figure 5: Thermal dependence of the specific heat per spin for some representative values of the magnetic field and two different values of the interaction ratio: (a)  $J_1 J = 0.6$ ; (b)  $J_1 J = 0.8$ . The presence of a low-temperature peak signals vicinity of a field-driven quantum phase transition. The intensity of the low-temperature peak brings information about a relative degeneracy between the ground state and low-lying excited states.

and QFO phases have the same degree of transverse correlation, while the transverse components of spins are completely uncorrelated within the CFO phase. The negative sign of the transverse correlations reflects the antiferromagnetic character of the intrarung coupling. However, this correlation is not fully saturated due to a topological frustration of a triangular unit caused by the antiferromagnetic interactions. The transverse correlation for  $J_1/J = 0.8$  [Fig. 6(b)] also exhibits a single intermediate plateau at zero temperature corresponding to the MFI and MFO phases. Contrary to this, there is no transverse correlation in the CAF and CFO ground states. Thermal excitations have diverse impact upon the transverse correlations in these two special cases.

In the former case  $J_1/J = 0.6$ , the low-energy thermal excitations just make an abrupt jump between the distinct plateaus smoother. On the contrary, two new features emerge in the latter case  $J_1/J = 0.8$ . First, strong transverse correlations can be thermally induced above the classical CAF ground state on account of thermal excitations from the classical to quantum states. Second, the field-induced quantum phase transition between the MFI and MFO ground states is manifested by a pronounced bump in the transverse correlation, which can be observed just at non-zero temperatures while it is completely absent at zero temperature.

The longitudinal correlation function shown in Fig. 7 also displays some features that deserve to be closely analyzed. First, the longitudinal correlation is fully saturated only within the classical ground states CAF and CFO. Both QAF and QFO phases possess negative (antiferromagnetic) but unsaturated longitudinal correlation at zero temperature, while both MFI and MFO phases have the same degree of positive (ferromagnetic) longitudinal correlation. Thermal excitations from the classical CAF ground state may populate excited states of quantum character and hence, they are able to promote a sign reversal of the longitudinal correlation as illustrated in the low-field regime of Fig. 7(b).

### 3.5. Adiabatic demagnetization

It is well known that several frustrated spin systems may exhibit an enhanced magnetocaloric effect during the adiabatic demagnetization, which might be of practical importance for low-temperature magnetic refrigeration [16]. Owing to this fact, let us also investigate the adiabatic demagnetization of the spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg triangular tube under adiabatic (iso-entropic) conditions. Fig. 8 illustrates typical iso-entropic curves in the temperature versus magnetic field parameter space for two different magnetization scenarios discussed previously. The sequence of three field-induced quantum phase transitions CFO→MFO→QFO→QAF upon adiabatic removal of the magnetic field is reflected in the relevant temperature changes shown in Fig. 8(a). The other particular case shown in Fig. 8(b) reflects the another possible sequence of three field-induced quantum phase transitions CFO→MFO→MFI→CAF. In both cases, the most pronounced changes of temperature can be observed in a close vicinity of the critical fields due to non-zero value of the residual entropy. It could be thus concluded that an enhanced magnetocaloric effect is achieved provided that the entropy is set sufficiently close to one of its ground-state residual values.

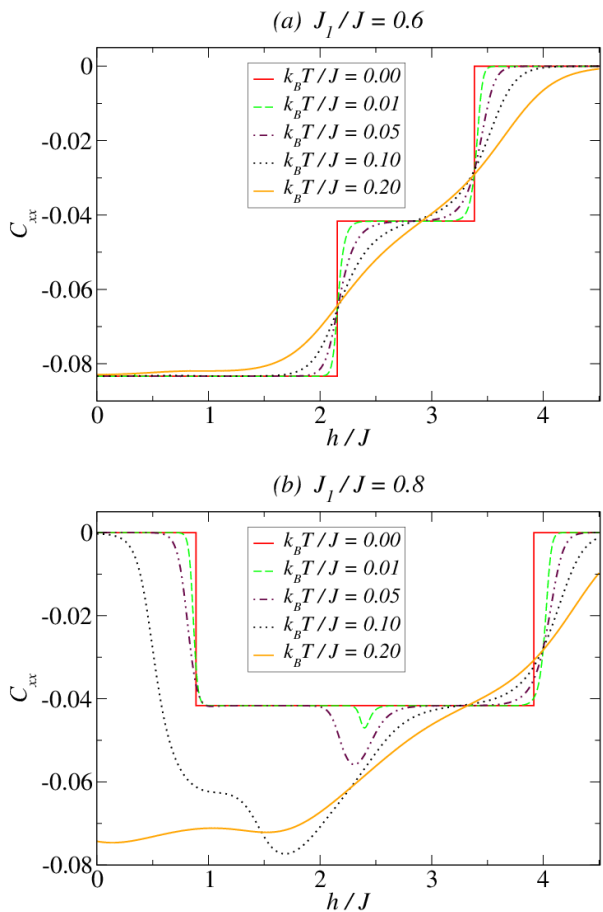


Figure 6: The transverse correlation function  $C_{xx}$  as a function of the magnetic field for a few different temperatures and two selected values of the interaction ratio: (a)  $J_1/J = 0.6$ ; (b)  $J_1/J = 0.8$ . A single intermediate plateau in Fig. 6(a) corresponds at zero temperature to the MFO ground state, while a single intermediate plateau in Fig. 6(b) incorporates at zero temperature both MFI and MFO ground states.

#### 4. Conclusion

In the present work, we have investigated the magnetization process and thermodynamic behavior of the frustrated spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg triangular tube. The model was exactly solved through the transfer-matrix method by taking advantage of the local conservation law for the total spin on the Heisenberg triangular plaquettes. This procedure enabled us to obtain exact results for some basic thermodynamic quantities including the magnetization, entropy, specific heat and pair correlation functions.

It has been shown that the low-temperature magnetization curves display intermediate plateaus at zero, one-third and two-thirds of the saturation magnetization, which signal discontinuous quantum

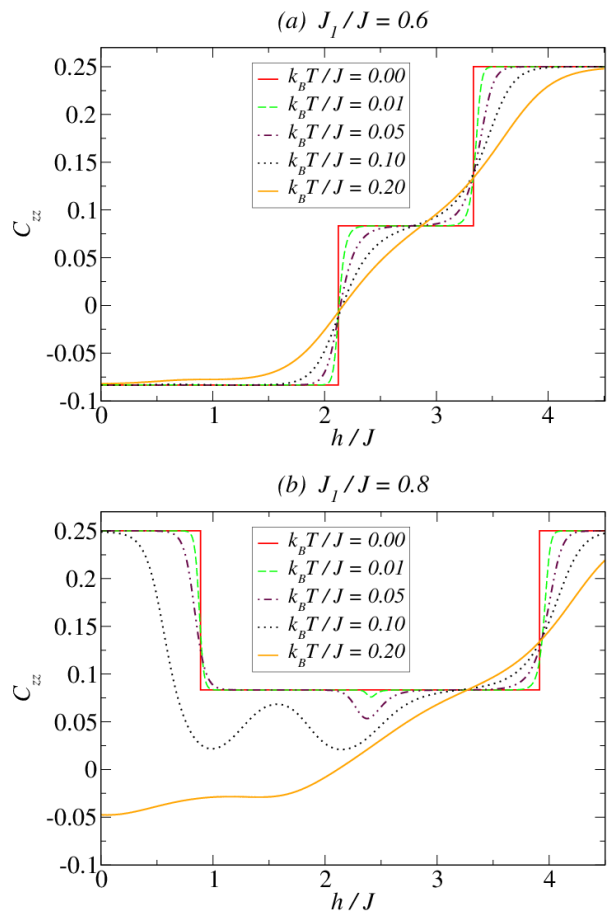


Figure 7: The longitudinal correlation function  $C_{zz}$  as a function of the magnetic field for a few different temperatures and two selected values of the interaction ratio: (a)  $J_1/J = 0.6$ ; (b)  $J_1/J = 0.8$ . A single intermediate plateau in Fig. 7(a) corresponds at zero temperature to the MFO ground state, while a single intermediate plateau in Fig. 7(b) incorporates at zero temperature both MFI and MFO ground states.

phase transitions promoted by the external magnetic field. At the critical fields, the investigated system has a macroscopic residual entropy. We have also computed typical adiabatic changes of temperature achieved upon lowering of the external magnetic field, which imply an enhanced magnetocaloric effect near all field-driven quantum phase transitions. Further, it has been demonstrated that the specific heat exhibits diverse thermal dependences, which may include an anomalous low-temperature peak due to a large relative difference between the ground-state and first-excited-state degeneracies.

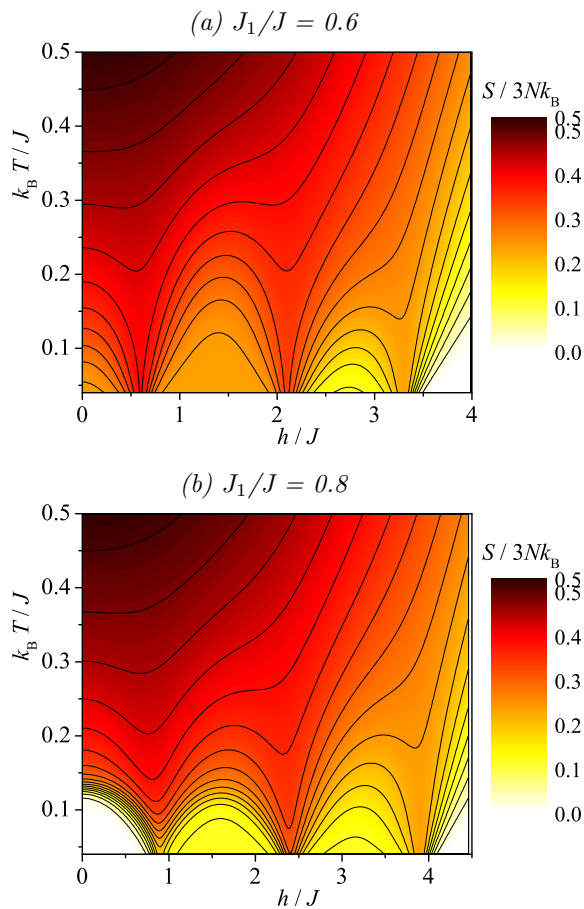


Figure 8: Iso-entropic changes of temperature in response to variation of the external magnetic field for two different values of the interaction ratio: (a)  $\frac{J_1}{J} = 0.6$ ; (b)  $\frac{J_1}{J} = 0.8$ . The enhanced magnetocaloric effect, i.e. large slope of the iso-entropic curves, is achieved at low temperatures when the entropy is selected sufficiently close to one of its residual values.

#### Acknowledgments

This work was partially supported by CNPq, CAPES, and FINEP (Federal Brazilian Agencies), as well as FAPEAL (Alagoas State Agency). R.C.A. thanks CAPES for financial support, and Faculty of Science of P. J. Šafárik University in Košice - Slovakia for the afforded hospitality. J.S. acknowledges financial support of Ministry of Education of Slovak Republic provided under the VEGA grant No. 1/0043/16 and by the grant of the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-14-0073.

#### References

[1] Pathak A 2013 *Elements of Quantum Computation and Quantum Communication* (CRC Press)

ISBN 9781466517929

- [2] Lacroix C, Mendels P and Mila F 2011 *Introduction to Frustrated Magnetism* (Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg)
- [3] Baake M and Grimm U 1995 *Perspectives on Solvable Models* (Singapore: World Scientific Publishing Co Pte Ltd)
- [4] Amico L, Osterloh A, Plastina F, Fazio R and Massimo Palma G 2004 *Physical Review A* **69** 022304 (Preprint quant-ph/0307048)
- [5] Bengtsson I and Życzkowski K 2006 *Geometry of quantum states: an introduction to quantum entanglement* (Cambridge University Press)
- [6] Honecker, A, Mila, F and Troyer, M 2000 *Eur. Phys. J. B* **15** 227–233 URL <http://dx.doi.org/10.1007/s100510051120>
- [7] Takano M 1996 *Physica C: Superconductivity* **263** 468 – 474 ISSN 0921-4534 proceedings of the International Symposium on Frontiers of High - Tc Superconductivity
- [8] Chiari B, Piovesana O, Tarantelli T and Zanazzi P F 1990 *Inorganic Chemistry* **29** 1172–1176 (Preprint <http://dx.doi.org/10.1021/ic00331a013>)
- [9] Watson B C, Kotov V N, Meisel M W, Hall D W, Granroth G E, Montfrooij W T, Nagler S E, Jensen D A, Backov R, Petruska M A, Fanucci G E and Talham D R 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86**(22) 5168–5171
- [10] Landee C P, Turnbull M M, Galeriu C, Giantsidis J and Woodward F M 2001 *Phys. Rev. B* **63**(10) 100402
- [11] Korotin M A, Anisimov V I, Saha-Dasgupta T and Dasgupta I 2000 *Journal of Physics: Condensed Matter* **12** 113
- [12] Oshikawa M, Yamanaka M and Affleck I 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78**(10) 1984–1987
- [13] Strečka J, Alécio R C, Lyra M L and Rojas O 2016 *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **409** 124 – 133 ISSN 0304-8853
- [14] Alécio R C, Lyra M L and Strečka J 2016 *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **417** 294 – 301 ISSN 0304-8853
- [15] Anton H and Rorres C 2010 *Elementary Linear Algebra: Applications Version* (John Wiley & Sons) ISBN 9780470432051
- [16] Honecker A and Wessel S 2006 *Physica B Condensed Matter* **378** 1098–1099 (Preprint cond-mat/0508123)